



Universite Chouaib Doukkali
Faculte des Sciences
El Jadida

Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée

Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP5–

Ahmed Jellal[1]

Cours

Mecanique Quantique

Quantum Mechanics: A fundamental theory of matter and energy that explains facts, which previous physical theories were unable to account for. In particular the fact that energy is absorbed and released in small, discrete quantities (quanta), and that all matter displays both wavelike and particlelike properties, especially when viewed at atomic and subatomic scales. Quantum mechanics suggests that the behavior of matter and energy is inherently probabilistic and that the effect of the observer on the physical system being observed must be understood as a part of that system. Also called quantum physics, quantum theory.

[1]jellal.ucd@gmail.com

Contents

Chapitre 1

Rappels Et Complements

1.1 Introduction

1.1.1 But et objets de la mécanique quantique

Le rôle de la mécanique quantique est de décrire le comportement et donner les lois d'évolution des constituents microscopiques de la matière. Plus précisément, les phénomènes quantiques se manifestent pour des objets de petites tailles Δx et/ou de petites impulsions Δp, tels que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2} \tag{1.1}$$

avec $h = 6.62610^{-34}$Js est la constante de Plank.

1.1.2 Mécaniques classique et quantique

- En mécanique classique une particule est un objet ponctuel décrit par un point $(\vec{x}, \vec{p})$ dans l'espace de phase (position, impulsion).
- En mécanique quantique une particule est un objet étendu, décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{x})$.
- Le rôle de la mécanique quantique est de donner les lois qui gouverne l'évolution de ces objets. Ce sont les équations de Hamilton (ou Newton) dans le cas classique et l'équation de Schrödinger ou bien équation de Heisenberg dans le cas quantique.

Mécanique	Classique	Quantique
Non relativiste	Mécanique de Newton (1687)	Mécanique quantique(1925)
Relativiste	Relativité restreinte (1905) Equations de Maxwell (1865)	Théorie quantique des champs (≥1930)
Relativité Générale	Relativité générale (1916)	... ? théorie des cordes ?...

1.1.3 Prérequis supposés

- En mathématiques : Notion d'espace vectoriel et de transformée de Fourier, théorie des matrices.
- En physique : Mécanique analytique et Hamiltonienne.
- En mécanique quantique : Cours et TD de DEUG

1.1.4 Conseils

- Travailler le cours avec des livres.
- Préparer TD à l'avance.

1.1.5 Références

- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloë, *Mécanique Quantique*
- Richard Feynmann, *Mécanique Quantique*
- Albert Messiah, *Mécanique Quantique*
- Jean-Luis Basvedant, *Mécanique Quantique*
- Edgard Elbaz, *Mécanique Quantique*

1.2 Particule Quantique à une Dimension

1.2.1 Introduction

Rappel concerant une particule en mouvement sur l'axe x :

- La particule quantique est isolée de son environnement, c'est à dire elle n'exerce aucune force sur le reste de la nature.
- Son envirenement exerce sur elle une certaine force

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \tag{1.2}$$

  avec $V(x)$ est l'énergie potentielle.
- Particule quantique est considérée comme une onde (un objet étendu et non ponctuel).

  Exemples :

  ✓ Atome vibrant au coeur d'un matériau ou dans une molécule soumis aux forces des atomes voisins.

  ✓ Electron libre se déplaçant dans un fil conducteur.

1.2.2 Espace des états

1.2.2.1 Espace vectoriel des fonctions d'onde

Définition :

Une fonction d'onde est un outil mathématique à valeur complexe qui permet de décrire l'état spatial d'une particule. Pour un espace d'une dimension paramétré par la position $x \in \mathbb{R}$, une fonction d'onde est

$$\psi : x \longrightarrow \psi(x) \in \mathbb{C}. \tag{1.3}$$

L'ensemble des fonctions d'ondes noté $\mathcal{H}$ forme un espace vectoriel complexe. En effet, si $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ et $\lambda \in \mathbb{C}$, alors

$$\varphi = (\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{H} : \qquad \text{Somme} \tag{1.4}$$

$$\phi = \lambda\psi_1 \in \mathcal{H} : \qquad \text{Produit} \tag{1.5}$$

NB : $\mathcal{H}$ est un espace vectoriel de dimension infnie car ψ est détérminée par les valeurs de $\psi(x)$ prises en une infinité de valeurs différentes de x.

Notation de Dirac :

Eqs. (1.4) et (1.5) deviennent

$$\mid \varphi\rangle = \mid \psi_1\rangle + \mid \psi_2\rangle \tag{1.6}$$

$$\mid \phi\rangle = \lambda \mid \psi_1\rangle. \tag{1.7}$$

Rien est nouveau dans cette notation juste question de simplification.

Complément :

- Un groupe est un ensemble G munit d'une loi interne notée $(\cdot)$: $(G, G) \longrightarrow G$, dont les élements vérifiant
  - ✓ Associative $\forall a, b, c \in G, \qquad a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$
  - ✓ Identité $\mathbb{I}$: $\forall g \in G, \qquad 1 \cdot g = g \cdot 1 = g$
  - ✓ Inverse : $\forall g \in G\ \exists g^{-1} \in G, \qquad g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = \mathbb{I}$
- Group commutatif : $\forall g, h \in G, \qquad g \cdot h = h \cdot g$
- Espace vectoriel complexe E est un ensemble munit d'une loi interne notée $+$ tel que $(E, +)$ est un group commutatif et munit d'une loi externe notée $(\cdot)$: $(\mathbb{C}, E) \longrightarrow E$ qui est distributive par rapport à la lois $+$: $\lambda \cdot (\nu + \omega) = \lambda \cdot \nu + \lambda \cdot \omega$.
- Espace vectoriel réel si la loi externe est : $(\mathbb{R}, E) \longrightarrow E$.
- Espace vectoriel sur $\mathbb{K}$ est un ensemble non vide E munit d'une loi interne

$$E \times E \longrightarrow E, \qquad (x, y) \longrightarrow x + y \tag{1.8}$$

et une loi externe

$$(\mathbb{K}, E) \equiv \mathbb{K} \times E \longrightarrow E, \qquad (\alpha, y) \longrightarrow \alpha x \tag{1.9}$$

tels que :

  - ✓ (E,+) est un groupe commutatif (abélien)
  - ✓ $\forall x, y \in \mathbb{E}$, $\forall \alpha,\ \beta \in \mathbb{K}$

$$\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y \tag{1.10}$$

$$(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x \tag{1.11}$$

$$(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x) \tag{1.12}$$

$$(1 \cdot x)x = x \tag{1.13}$$

Exemples :

Ondes planes :

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{p_x}{\hbar}\right) \tag{1.14}$$

$$\equiv \mid p\rangle : \text{notation de Dirac} \tag{1.15}$$

avec l'impulsion $p \in \mathbb{R}$.

Paquet d'onde Gaussien : Le paquet d'onde Gaussien de position moyenne $x_0 \in \mathbb{R}$, d'impulsion moyenne $p_0 \in \mathbb{R}$ et de largeur $\sigma \in \mathbb{R}$ est

$$\psi_{x_0,p_0,\sigma}(x) = \frac{1}{(\pi r^2)^{1/4}} \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)}{2\sigma^2}\right) \tag{1.16}$$

$$\equiv \mid x_0, p_0, \sigma\rangle : \text{notation de Dirac.} \tag{1.17}$$

1.2.2.2 Produit scalaire

Le produit scalaire Hermitien de deux fonctions d'ondes $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ est le nombre complexe noté $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$:

$$\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}_1(x)\psi_2(x)dx \tag{1.18}$$

avec $\overline{\psi}_1(x)$ est le nombre complexe conjugué de $\psi_1(x)$.

Propriétés :

$$|\langle\psi \mid \varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi \mid \varphi\rangle\langle\varphi \mid \psi\rangle \quad : \quad \text{Inégalité de Schwartz} \tag{1.19}$$

$$\| \psi + \varphi \| \leq \| \psi \| + \| \varphi \| : \quad \text{Inégalité triangulaire} \tag{1.20}$$

avec $\| \psi \|$ est la norme de la fonction ψ.

Par définition, un produit scalaire Hermitien $\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle \in \mathbb{C}$ sur un espace vectoriel $\mathcal{H}$ doit vérifer les propriétés suivantes :

1. $\langle\psi_2 \mid \psi_1\rangle = \overline{\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle}$: Complexe conjugué.
2. $\langle\psi_1 \mid \lambda\psi + \mu\varphi\rangle = \lambda\langle\psi_2 \mid \psi\rangle + \mu\langle\psi_1 \mid \varphi\rangle$: Linéarité à droite
3. $\langle\psi \mid \psi\rangle \geq 0$ avec égalité si et seulement si $\mid \psi\rangle = 0$

ψ_1 et ψ_2 sont orthogonales si $\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle = 0$.

En géométrie Euclidienne: $\| \psi \|^2 = \langle\psi \mid \psi\rangle$ définit la norme au carré de la fonction ψ :

$$\| \psi \|^2 = \langle\psi \mid \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 > 0 \tag{1.21}$$

Remarques :

- Il y a des fonctions dont la norme est infinie comme par exemple onde plane :

$$\langle\psi_p|\psi_p\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{h}dx = \infty.$$

- Le sous espace des fonctions pour lesquelles la norme est finie est appelé espace de Hilbert des fonctions d'ondes (espace des fonctions de carré sommable) noté $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

Propriétés :

Pour $\lambda \in \mathbb{C}$, on a

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\langle\psi_2|\psi_1\rangle} \tag{1.22}$$

$$\langle\lambda\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\lambda}\,\langle\psi_1|\psi_2\rangle \tag{1.23}$$

$$\langle\psi_1 + \psi_2|\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\psi_3\rangle + \langle\psi_2|\psi_3\rangle \tag{1.24}$$

Exemples :

- $\mathcal{H} = L^2([0, L])$: espace des fonctions de carré sommable $\psi(x)$ décrivant une particule confinnée dans le segment $x \in [0, L]$.
- $\mathcal{H} = L^2(S^1)$: espace des fonctions de carré sommable périodiques $\psi(\theta)$, où θ est la position angulaire sur un fil circulaire où la particule est confinée.

1.2.2.3 Espace dual

L'opération notée $\langle\phi|$:

$$\langle\phi| : \mathcal{H} \to \mathbb{C}, \qquad |\psi\rangle \to \langle\phi|\psi\rangle \tag{1.25}$$

alors $\langle\phi|$ est dite forme linéaire sur $\mathcal{H}$ car

$$\langle\phi|\lambda\psi_1 + \mu\psi_2\rangle = \lambda\,\langle\phi|\psi_1\rangle + \mu\,\langle\phi|\psi_2\rangle \tag{1.26}$$

ou aussi appelé un vecteur dual. L'espace des vecteurs duaux noté $\mathcal{H}^*$ est dit espace dual. Le vecteur dual $\langle\phi|$ est aussi appelé bra selon la notation de Dirac.

Conclusion : à partir d'un vecteur $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, on peut construire un vecteur dual $\langle\phi| \in \mathcal{H}^*$. Par exemple, on peut avoir

$$|\phi\rangle = \lambda\,\langle\psi_1| + \mu\,|\psi_2\rangle \tag{1.27}$$

$$\Longrightarrow \langle\phi| = \overline{\lambda}\,\langle\psi_1| + \overline{\mu}\,\langle\psi_2|\,. \tag{1.28}$$

1.2.3 Opérateurs différentiels

1.2.3.1 Définitions

Un opérateur transforme une fonction d'onde (un vecteur) en une autre fonction d'onde (autre vecteur). C'est donc une opération dans l'espace des fonctions d'ondes $\mathcal{H}$.

- Opérateur de position $\hat{x}$:

$$|\phi\rangle = \hat{x}\,|\psi\rangle \quad \text{défni par} \qquad \phi(x) = x\psi(x), \qquad \forall x \in \mathbb{R} \tag{1.29}$$

- Opérateur d'impulssion $\hat{p}$:

$$|\phi\rangle = \hat{p}\,|\psi\rangle \quad \text{défni par} \qquad \phi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}, \qquad \forall x \in \mathbb{R} \tag{1.30}$$

- Opérateur Hamiltonien $\hat{H}$:

$$|\phi\rangle = \hat{H}\,|\psi\rangle \quad \text{défni par} \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{1.31}$$

$$\Longrightarrow \phi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x), \qquad \forall x \in \mathbb{R} \tag{1.32}$$

1.2.3.2 Opérateurs linéaires

Définition :
$\hat{T}$ est un opérateur linéaire si $\forall\,|\psi_1\rangle\,,|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ et $\forall\lambda \in \mathbb{C}$, on a

$$\hat{T}(\lambda\,|\psi_1\rangle) = \lambda(\hat{T}\,|\psi_1\rangle) \tag{1.33}$$

$$\hat{T}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \hat{T}\,|\psi_1\rangle + \hat{T}\,|\psi_2\rangle \tag{1.34}$$

Exemples : $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$
Remarques :

- L'ensemble des opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$ forme un espace vectoriel, noté $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.
- Si $\hat{T}_1$ et $\hat{T}_2$ sont deux opérateurs linéaires alors $\hat{T}_1\hat{T}_2$ (la composition) est aussi linéaire.

1.2.3.3 Opérateurs adjoints et autoadjoints

Dans la suite on note $\hat{T}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ par $\left|\hat{T}\psi\right\rangle$, qui signifie la même chose.

Définition 1 :

$\hat{T}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ est un opérateur linéaire, l'opérateur adjoint de $\hat{T}$ est l'opérateur linéaire, noté $\hat{T}^\dagger$, vérifiant

$$\left\langle \phi \middle| \hat{T}^\dagger \psi \right\rangle = \left\langle \hat{T}\phi \middle| \psi \right\rangle, \qquad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.35}$$

Propriétés :

$$\left(\hat{T}^\dagger\right)^\dagger = \hat{T} \tag{1.36}$$

$$\left(\hat{T}_1\hat{T}_2\right)^\dagger = \hat{T}_2{}^\dagger \hat{T}_1{}^\dagger \tag{1.37}$$

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{T}_2\right)^\dagger = \hat{T}_1{}^\dagger + \hat{T}_2{}^\dagger \tag{1.38}$$

$$\left(\hat{T}^n\right)^\dagger = \left(\hat{T}^\dagger\right)^n, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{1.39}$$

Définition 2 :

$\hat{T}$ est autoadjoint ou hermitique si $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$, c'est à dire

$$\left\langle \phi \middle| \hat{T}\psi \right\rangle = \left\langle \hat{T}\phi \middle| \psi \right\rangle \tag{1.40}$$

Exemples :

$\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$ sont des opérateurs autoadjoints. En effet $\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}$ on a :

Pour $\hat{x}$:

$$\left\langle \phi \middle| x^\dagger \psi \right\rangle = \langle \hat{x}\phi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{x\phi}\psi dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi} x \psi dx = \langle \phi | \hat{x}\psi \rangle \qquad \Longrightarrow \qquad x^\dagger = \hat{x} \tag{1.41}$$

Pour $\hat{p}$:

$$\left\langle \phi \middle| \hat{p}^\dagger \psi \right\rangle = \langle \hat{p}\phi | \psi \rangle = \int \overline{-i\hbar \frac{d\phi}{dx}} \psi dx = -i\hbar \int \overline{\phi} \frac{d\psi}{dx} dx = \langle \phi | \hat{p}\psi \rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{p}^\dagger = \hat{p} \tag{1.42}$$

où on a utilisé la formule d'intégration par partie à savoir

$$i\hbar \left[\overline{\phi}\psi\right]_{-\infty}^{+\infty} = i\hbar \int \overline{\frac{d\phi}{dx}} \psi dx + i\hbar \int \overline{\phi} \frac{d\psi}{dx} dx = 0 \tag{1.43}$$

Pour $\hat{H}$:

$$\hat{H}^\dagger = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)^\dagger = \left(\frac{p^2}{2m}\right)^\dagger + (V(x))^\dagger = \hat{H} \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{H}^\dagger = \hat{H}. \tag{1.44}$$

1.2.4 Evolution d'un état quantique

La particule évoluant au cours du temps t est décrite par l'équation de Schrödinger. Cette équation donne la loi d'évolution du vecteur $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{1.45}$$

ou en terme de fonction d'onde

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t),\qquad\forall x,t. \tag{1.46}$$

avec $\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle$.

Remarques :

- On utiluse la dérivée droite $\frac{d}{dt}$ s'il s'agit d'une seule variable comme dans Eq. (1.45) et la dérivée partielle $\frac{\partial}{\partial t}$ s'il y a plusieurs variable comme dans Eq. (1.46).
- Eq. (1.45) donne la modification instantanée de l'onde à un instant précis. Pour cela $\hat{H}$ est dit générateur de l'évolution temporelle.
- Equivalence de Eq. (1.45) en mécanique classique sont les équations du mouvement de Hamilton.
- Eq. (1.45) est linéaire car $\begin{cases}|\phi_1(t)\rangle=|\psi_1(t)\rangle+|\psi_2(t)\rangle\\ |\phi_2(t)\rangle=\lambda|\psi(t)\rangle\end{cases}$
- La fonction d'onde conserve sa norme au cours du temps $\parallel\psi\parallel^2=\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=$ cte.

En effet, d'après Eq. (1.45) on a

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle=\left\langle\frac{d\psi}{dt}\middle|\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|\frac{d\psi}{dt}\right\rangle=\left\langle -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\psi\middle|\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\psi\right\rangle=0$$

car $\hat{H}$ est Hermitien ($\hat{H}^\dagger=\hat{H}$).

Exercice : montrer que le produit scalaire est conservé $\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle=$ cte.

NB : En général, il est impossible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger sauf pour quelques cas particuliers.

1.2.5 Bases

1.2.5.1 Base orthonormée

Définition :

L'ensemble des vecteurs $\{|V_i\rangle\in\mathcal{H},\ i=1,2,\cdots\}$ forme une base orthonormée (b.o.n.) de l'espace $\mathcal{H}$, si

$$\langle V_i|V_j\rangle=\delta_{ij},\qquad\delta_{ij}=\begin{cases}1, & \text{si } i=j\\ 0, & \text{si } i\neq j\end{cases}$$

et pour tout $|\phi\rangle\in\mathcal{H}$ doit se décomposer sur cette base

$$|\phi\rangle=\sum_{i=1,2,\cdots}\phi_i\,|V_i\rangle\,,\qquad\phi_i\in\mathbb{C} \tag{1.47}$$

où les composentes ϕ_i sont donneés par le produit scalair

$$\phi_i=\langle V_i|\phi\rangle \tag{1.48}$$

En effet,

$$\langle V_i|\phi\rangle=\sum_j\phi_j\,\langle V_i|V_j\rangle=\sum_j\phi_j\delta_{ij}=\phi_i \tag{1.49}$$

Remarques

- Dimension $\mathcal{H} = \infty$ (infinie) si l'ensemble $\{|V_i\rangle, i = 1, 2, \cdots\}$ est infinie.
- Dimension $\mathcal{H} = N < \infty$ si l'ensemble $\{|V_i\rangle, i = 1, 2, \cdots, N\}$ est finie.

Exemples :

- $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ de dimension infinie ∞.
- Espace de Hilbert de spin 1/2 est de dimension finie $N = 2$.

D'après Eqs. (1.47) et (1.48), la norme de $|\phi\rangle$ est

$$\langle\phi|\phi\rangle = \sum_i |\phi_i|^2 \tag{1.50}$$

car

$$\langle\phi|\phi\rangle = \left(\sum_i \overline{\phi}_i \langle V_i|\right)\left(\sum_j \phi_j |V_j\rangle\right) = \sum_{ij} \overline{\phi}_i \phi_j \langle V_i|V_j\rangle = \sum_i \overline{\phi}_i \phi_i = \sum_i |\phi_i|^2 . \tag{1.51}$$

On peut représenter le vecteur $|\phi\rangle$ par le tableau de composantes complexes (ou vecteur colonne) par rapport à la base $|Vi\rangle$:

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$$

Remarque : Si on choisit une autre basse, $|\phi\rangle$ aura d'autres composantes.

Exemple :

Considérons une particule confinée sur un cercle S^1 dont l'espace de Hilbert (espace des fonctions de carré sommable) est

$$\mathcal{H} = L^2(S^1)$$

Si le fil est de circonférence L, et x est la position le long du fil, alors $\mathcal{H}$ est l'espace des fonctions périodiques vérifiant la condition :

$$\phi(x + L) = \phi(x).$$

On montre que l'ensemble des fonctions

$$V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik\frac{2\pi x}{L}}, \qquad k \in \mathbb{Z} \tag{1.52}$$

forme une b.o.n. de $\mathcal{H} = L^2(S^1)$. En effet,

- L'orthogonalité :

$$\langle V_k|V_l\rangle = \int_0^L V_k^*(x) V_l(x) dx = \frac{1}{L}\int_0^L e^{i(l-k)\frac{2\pi x}{L}} dx$$

avec $\langle V_k|V_l\rangle = \begin{cases} 0, & \text{si } k \neq l \\ 1, & \text{si } k = l \end{cases}$

- D'après le théorème des séries de Fourier, toute fonction périodique $\phi(x)$ de carré sommable peut se décomposer sous la forme :

$$\phi(x) = \sum_k \frac{\phi_k}{\sqrt{L}} e^{ik\frac{2\pi x}{L}} = \sum_k \phi_k V_k(x).$$

Remarque : $\{|V_k\rangle\}$ est appelé base de Fourier de $\mathcal{H} = L^2(S^1)$.

1.2.5.2 Relation de fermeture

Suivant Eq. (1.47) et Eq. (1.48), on a

$$|\phi\rangle = \sum_i (\langle V_i|\phi\rangle) |V_i\rangle$$

On peut également écrire

$$|\phi\rangle = \sum_i |V_i\rangle (\langle V_i|\phi\rangle) = \left(\sum_i |V_i\rangle \langle V_i|\right) |\phi\rangle$$

ce qui implique

$$\sum_i |V_i\rangle \langle V_i| = \mathbb{I}. \tag{1.53}$$

Cette relation laisse le vecteur $|\phi\rangle$ inchangé et peut être considérée comme l'opérateur identité, est dite relation de fermeture.

Remarques :

- Eq. (1.53) peut se comprendre comme suit. Posons

  $$\hat{P}_i = |V_i\rangle \langle V_i| \Longrightarrow \hat{P}_i |\phi\rangle = |V_i\rangle \langle V_i|\phi\rangle = (\langle V_i|\phi\rangle) |V_i\rangle$$

  on voit que $\hat{P}_i$ est un opérateur qui transforme $|\phi\rangle$ en $\hat{P}_i |\phi\rangle$, c'est-à-dire $|\phi\rangle$ à une projection orthogonal sur le vecteur de base $|V_i\rangle$.

- Un projecteur orthogonal vérifiant les proprietés suiavantes :

  $$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i, \qquad \hat{P}_i^+ = \hat{P}_i$$

- $\sum_i \hat{P}_i = \mathbb{I}$

1.2.5.3 Expression d'un opérateur dans une base

En général, les éléments de matrice d'un opérateur $\hat{O}$ dans une $\{|V_i\rangle\}$ sont :

$$O_{ij} = \langle V_i| \hat{O} |V_j\rangle, \qquad i, j = 1, 2, \cdots$$

les O_{ij} sont les élements d'une matrice O. Si $\hat{O} |\psi\rangle = |\phi\rangle$, alors les composantes ϕ_i de $|\phi\rangle$ s'obtiennent à partir des composantes ψ_i de $|\psi\rangle$ par

$$\phi_i = \sum_j O_{ij} \psi_j.$$

En effet,

$$\phi_i = \langle V_i|\phi\rangle = \langle V_i| \hat{O} |\psi\rangle = \langle V_i| \hat{O} \sum_j |V_j\rangle \langle V_j|\psi\rangle = \sum_j \langle V_i| \hat{O} |V_j\rangle \langle V_j|\psi\rangle = \sum_j O_{ij} \psi_j.$$

1.2.5.4 Changement de base

Soient $\{|V_i\rangle\}$ et $\{|W_i\rangle\}$ sont deux b.o.n. différentes de $\mathcal{H}$. Si $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ un vecteur tel que ses composantes sur les deux bases sont

$$\begin{aligned} \phi_i &= \langle V_i|\phi\rangle \\ \widetilde{\phi}_i &= \langle W_i|\phi\rangle \end{aligned} \tag{1.54}$$

alors ϕ_i et $\widetilde{\phi}_i$ sont reliées par

$$\phi_i = \langle V_i|\,\mathbb{I}\,|\phi\rangle = \langle V_i|\sum_j \langle W_j|W_j\rangle\,|\phi\rangle = \sum_j \langle V_i|W_j\rangle\,\widetilde{\phi}_j = \sum_j O_{ij}\widetilde{\phi}_j$$

où O_{ij} sont les éléments de matrice de la "matrice de changement de base", qui est une matrice unitaire.

1.2.6 Spectre d'un opérateur

1.2.6.1 Définition et propriété

Définition :

Pour tout opérateur linéaire $\hat{T}$, on dit que la fonction $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ est un vecteur propre de l'opérateur $\hat{T}$ et $\lambda \in \mathbb{C}$ est sa valeur propre, si

$$\hat{T}\,|\phi\rangle = \lambda\,|\phi\rangle$$

L'ensemble de ces vecteurs propres et valeurs propres forment le spectre de $\hat{T}$.

Propriétés :

- Si $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$, alors la valeur propre $\lambda \in \mathbb{R}$ est reélle.
  Démonstration :

  $$\overline{\lambda}\,\langle\phi|\phi\rangle = \langle\lambda\phi|\phi\rangle = \left\langle \hat{T}\phi\middle|\phi\right\rangle = \left\langle \phi\middle|\hat{T}^\dagger\phi\right\rangle = \lambda\,\langle\phi|\phi\rangle \Longrightarrow \overline{\lambda} = \lambda.$$

- Si $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$, $\hat{T}\,|\phi_1\rangle = \lambda_1\,|\phi_1\rangle$ et $\hat{T}\,|\phi_2\rangle = \lambda_2\,|\phi_2\rangle$, avec $\lambda_1 \neq \lambda_2$, alors

  $$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0.$$

  Démonstration :

  $$\langle\phi_2|\,\hat{T}\,|\phi_1\rangle = \lambda_1\,\langle\phi_2|\phi_1\rangle = \lambda_2\,\langle\phi_2|\phi_1\rangle \Longrightarrow (\lambda_1 - \lambda_2)\,\langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0 \Longrightarrow \langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0.$$

Remarques :

- Si $\hat{T}\,|\phi\rangle = \lambda\,|\phi\rangle$ alors $\left|\phi'\right\rangle = \mu\,|\phi\rangle$ ($\mu \in \mathbb{C}$) est un aussi vecteur propre de $\hat{T}$. En effet,

  $$\hat{T}\left|\phi'\right\rangle = \hat{T}(\mu\,|\phi\rangle) = \mu\hat{T}\,|\phi\rangle = \lambda\mu\,|\phi\rangle = \lambda\left|\phi'\right\rangle.$$

- La somme de deux vecteurs propres n'est pas un vecteur propre :

  $$\hat{T}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) = \lambda_1\,|\phi_1\rangle + \lambda_2\,|\phi_2\rangle$$

  sauf si $\lambda_1 = \lambda_2$.

1.2.6.2 Spectre de l'opérateur $\hat{x}$

On a $\langle x|\phi\rangle = \phi(x)$ et $\hat{x}\phi(x) = x\phi(x) \Longleftrightarrow \langle x|\hat{x}|\phi\rangle = x\langle x|\phi\rangle$, donc

$$\begin{cases} \langle x|\hat{x} = x\langle x| \\ \hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \end{cases} \tag{1.55}$$

avec $|x\rangle$ le est vecteur propre de l'opérateur $\hat{x}$ associé à la valeur propre x.

Conclusion : Le spectre de l'opérateur $\hat{x}$ est formé par les valeurs propres $x \in \mathbb{R}$, et les états $|x\rangle$ correspondants. On dit que $\hat{x}$ a un spectre continu (car toutes les valeurs de x sont permises, formant un ensemble continu).

Relation de fermeture en position :

$\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$, on a

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \overline{\psi_1}(x)\psi_2(x)dx = \int \langle\psi_1|x\rangle\langle x|\psi_2\rangle dx \tag{1.56}$$

donc

$$\int |x\rangle\langle x| dx = \mathbb{I} \tag{1.57}$$

c'est la relation de fermeture dans la base position.

Remarques :

- $\phi(x)$ est la composante du vecteur $|\phi\rangle$ dans la base $\{|x\rangle\}$.
- On a

$$\langle x|\phi\rangle = \int \left\langle x\middle|x'\right\rangle\left\langle x'\middle|\phi\right\rangle dx'$$

$\Longrightarrow$

$$\phi(x) = \int \delta(x' - x)\phi(x')dx$$

donc

$$\left\langle x\middle|x'\right\rangle = \delta(x' - x)$$

1.2.6.3 Spectre de l'opérateur $\hat{p}$

Pour déterminer les vecteurs propres et valeurs propres il faut résoudre :

$$\hat{p}|\phi_p\rangle = p|\phi_p\rangle$$

avec $\phi_p(x) = \langle x|\phi_p\rangle$. Cela donne

$$-i\hbar\frac{d\phi_p(x)}{dx} = p\phi_p(x) \Longrightarrow \phi_p(x) = ce^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

soit $c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$. Le spectre de $\hat{p}$ est constitué par les valeurs propres $p \in \mathbb{R}$ associées aux vecteurs propres noté $|p\rangle$ donnés par les fonctions

$$\phi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}, \qquad p \in \mathbb{R}$$

Chaque fonction est dite onde plane.

Remarques :

- Le spectre de $\hat{p}$ est continue
- La norme $\langle p|p\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi\hbar}dx = \infty$
- $\{|x\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$ sont des vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

1.2.6.4 Transformée de Fourier et relation de fermeture en impulsion

Les composantes du vecteur $|\phi\rangle$ dans la base $\{|p\rangle\}$ sont

$$\langle p|\phi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\phi\rangle \, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \phi(x) dx = \widetilde{\phi}(p)$$

avec $\langle p|\phi\rangle$ est la fonction transformée de Fourier $\widetilde{\phi}(p)$ de la fonction d'onde $\phi(p)$. On dit que $\{|p\rangle\}$ est la basse de Fourier et $\widetilde{\phi}(p)$ est la représentation en impulsion. La relation de Fourier inverse :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{ipx}{\hbar}} \widetilde{\phi}(p) dp$$

qui peut s'écrire en notation de Dirac comme

$$\langle x|\phi\rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\phi\rangle \, dp$$

ça implique la relation de fermeture dans la base d'impulsion

$$\int |p\rangle \langle p| \, dp = \mathbb{I}. \tag{1.58}$$

On peut écrire la norme de $|\phi\rangle$ soit comme

$$\langle \phi|\phi\rangle = \int \langle \phi|x\rangle \langle x|\phi\rangle \, dx = \int |\phi(x)|^2 dx$$

ou bien

$$\langle \phi|\phi\rangle = \int \langle \phi|p\rangle \langle p|\phi\rangle \, dp = \int |\widetilde{\phi}(p)|^2 dp$$

ce qui conduit à la relation de Parceval

$$\int |\widetilde{\phi}(p)|^2 dp = \int |\phi(x)|^2 dx$$

L'action de l'opérateur $\hat{p}$:

$$\langle p| \hat{p} |\phi\rangle = p \langle p|\phi\rangle$$

on trouve

$$(\hat{p}\widetilde{\phi})(p) = p\widetilde{\phi}(p)$$

Donc on voit que $\hat{p}$ agit comme une dérivation dans la base de position et comme une multiplication dans la base d'impulsion.

1.2.6.5 Spectre de l'opérateur $\hat{H}$

En général, le Hamiltonien H décrivant une particule dans une espace à une dimension est

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{1.59}$$

Supposons que $|\phi_E\rangle \in \mathcal{H}$ (non nulle) est satisfait à l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\hat{H} |\phi_E\rangle = E |\phi_E\rangle \tag{1.60}$$

où E est l'énergie associée à l'état $|\phi_E\rangle$.

Onde stationnaire : Au cours du temps, l'onde $|\phi(t)\rangle$ évolue comme suit

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}|\phi(t)\rangle = -i\frac{E}{\hbar}|\phi(t)\rangle .$$

Puisque E est une quantité constante, donc la solution est

$$|\phi(t)\rangle = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}|\phi(0)\rangle \tag{1.61}$$

c'est-à-dire

$$\phi(x,t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\phi(x,0) \tag{1.62}$$

NB : $|\phi(x,t)|$ est constant au cours du temps, seule sa phase change. On dit alors que $|\phi(t)\rangle$ est une onde stationnaire ou un état stationnaire.

Remarques :

- Les ondes sur une corde vibrante sont stationnaires (solutions de $\partial_t^2\phi - c^2\partial_x^2\phi = 0$).
- Les ondes stationnaires (vecteurs propres de $\hat{H}$) sont des solutions particulières.
- Les ondes stationnaires sont importantes pour les raisons suivantes :
  1 Au niveau mathématique, les vecteurs propres de $\hat{H}$ forment une base de l'espace total $\mathcal{H}$.
  2 A température (presque) nulle, un système non isolé se met dans son état de plus basse énergie, qui est l'onde stationnaire de plus basse énergie (état fondamental). A température plus élevée, on montre en physique statistique (loi de Boltzmann) que le système est dans une répartition statistique d'ondes stationnaires de diffiérentes énergies.
  3 Dans les expériences de la spectroscopie (sonder la matière par le rayonnement), on impose une force stationnaire au système (par exemple une onde monochromatique laser sur une molécule), pour la transister vers un état d'énergie spécifique.
- Pour l'opérateur de Schrödinger Eq. (1.59), les vecteurs propres peuvent être choisis comme étant des fonctions réelles $\phi(x)$, car l'équation différentielle est une équation réelle.

Exemple 1 : Particule libre sur l'axe x
Si $V(x) = 0$ alors $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, on a les resultas suivants :

- Les fonctions propres sont les ondes planes $|\phi_E\rangle = |p\rangle$ car $\hat{H}|\phi_E\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|p\rangle$ et donc $E = \frac{p^2}{2m} \geqslant 0$.
- Le spectre est continu, toutes les énergies sont permises, la particule peut partir à l'infini.
- Pour une valeur donnée de E, il y a deux fonctions propres différentes associées $\left\{ \begin{array}{l} |p\rangle \\ |-p\rangle \end{array} \right.$, avec $p = \sqrt{2mE}$. Donc E est 2 fois dégénérée.
- La relation de fermeture : $\int_{\mathbb{R}} |p\rangle\langle p|\, dp = \mathbb{I}$.
- Physiquement $|p\rangle$ correspond à une onde d'énergie E se déplaçant vers la droite, tandis que $|-p\rangle$ vers la gauche.

Exemple 2 : Particule libre sur un cercle

L'espace des fonctions périodiques est $\mathcal{H} = L^2(S^1)$. Pour une particule libre décrite par le Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, les fonctions d'onde sont $V_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik\frac{2\pi x}{L}}$. On a

$$\langle x| \hat{p} |V_k\rangle = -i\hbar \frac{dV_k(x)}{dx} = \frac{2\pi\hbar k}{L} V_k(x) = \frac{\hbar k}{L} V_k(x) = p_k \langle x|V_k\rangle$$

ce qui implique que les valeurs propres de l'impulsion sont discrètes :

$$p_k = \frac{\hbar k}{L}, \qquad k \in \mathbb{Z}$$

et l'énergie est solution de $\hat{H} |V_k\rangle = E_k |V_k\rangle$, donc

$$E_k = \frac{p_k^2}{2m}, \qquad k \in \mathbb{Z}.$$

qui est discrete et deux fois dégénérée (sauf si $k = 0$). La relation de fermeture pour la base $\{|V_k\rangle\}$ est

$$\sum_{k\in\mathbb{Z}} |V_k\rangle \langle V_k| = \mathbb{I}.$$

Remarque : En général, le spectre de $\hat{H}$ peut avoir une partie discrète et une autre continue.

1.2.6.6 Valeurs moyennes et variance de l'observable

Notons le spectre de l'observable $\hat{A}$ par

$$\hat{A} |\psi_a\rangle = A_a |\psi_a\rangle \tag{1.63}$$

où a est un indice discret ou continu. Dans la base de $\hat{A}$, un vecteur $|\psi\rangle$ quelconque se décompose comme

$$|\phi\rangle = \sum_a \phi_a |\psi_a\rangle, \qquad \phi_a = \langle\psi_a|\phi\rangle. \tag{1.64}$$

On pose la quantité

$$P_a = \frac{|\langle\psi_a|\phi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{|\phi_a|^2}{\langle\phi|\phi\rangle} \tag{1.65}$$

où P_a s'interprète comme la probabilité d'observer la valeur A_a dans le cadre d'une mesure.

Définition :

La valeur moyenne de $\hat{A}$:

$$\langle A\rangle = \sum_a P_a A_a \tag{1.66}$$

La variance :

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle \tag{1.67}$$

$$= \sum_a P_a (A_a - \langle A\rangle)^2 \tag{1.68}$$

ΔA est l'écart type ou encore l'incertitude sur la valeur de A.

Proposition :

Les relations en haut peuvent s'écrire comme suit

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \frac{\left\langle \phi \hat{A} \middle| \phi \right\rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} && (1.69)\\
(\Delta A)^2 &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 && (1.70)\\
&= \frac{\left\langle \phi \hat{A}^2 \middle| \phi \right\rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} - \left(\frac{\left\langle \phi \hat{A} \middle| \phi \right\rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right)^2 && (1.71)
\end{aligned}$$

Démonstration :

-
$$\begin{aligned}
\frac{\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} &= \frac{\sum_a \langle \psi_a | \overline{\phi}_a \hat{A} \sum_{a'} \phi_{a'} | \psi_{a'} \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \\
&= \frac{\sum_{a,a'} \langle \psi_a | \psi_{a'} \rangle A_{a'} \phi_a \phi_{a'}}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{A_a \phi_a \phi_a}{\langle \phi | \phi \rangle} \\
&= \sum_a A_a \frac{|\phi_a|^2}{\langle \phi | \phi \rangle} \\
&= \sum_a A_a P_a = \langle A \rangle
\end{aligned}$$

-
$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

1.2.6.7 Relation d'incertitude et relations de commutation

Soit $|\psi\rangle$ un état quantique, supposons que $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont deux opérateurs hérmitiques.

Définition :

Le commutateur de deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ est l'opérateur

$$\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (1.72)$$

Exemple : $\hat{q}$, $\hat{p} \longrightarrow [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \mathbb{I}$.

Plus généralement, l'incertitude de l'état $|\phi\rangle$ de $\hat{A}, \hat{B}$ est

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|, \qquad \forall\, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \qquad (1.73)$$

avec $\hat{A}\, |\phi\rangle = A\, |\phi\rangle$ et $\hat{B}\, |\phi\rangle = B\, |\phi\rangle$. En particulier pour $\hat{A} = \hat{q}$ et $\hat{B} = \hat{p}$, Eq. (1.73) devient l'inégalité de Heisenberg ou bien relation d'incertitude.

1.3 Théorie De La Symétrie

Dans cette section, on va étudier l'aspect algébrique de la particule quantique sans spin isolé, évoluent sur un axe x. En particulier on montre l'utilité de la théorie des groupes à travers la résolution du spectre de l'oscillateur Harmonique, voir chapitre 2.

1.3.1 Générateur $\hat{H}$ du translation dans le temps

1.3.1.1 Opérateur d'évolution

Rappellons que l'équation d'évolution de Schrödinger donne la modification instantanée $\frac{d|\psi\rangle}{dt}$ de l'état quantique. Étant donné un état initial $|\psi(0)\rangle$ à l'instant $t = 0$, nous allons voir qu'il est possible d'avoir l'expression de l'état $|\psi(t)\rangle$ à un instant t donné.

Proposition : supposons que $\hat{H}$ ne dépend pas du temps. L'évolution temporelle d'un état $|\psi(t)\rangle$ est

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle \tag{1.74}$$

où $\hat{U}(t)$ est appelé propagateur ou opérateur d'évolution ou encore opérateur de translation sur la durée t tel que

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)^n \tag{1.75}$$

L'équation (1.74) satisfait l'équation de Schödinger. En effet

$$\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = \frac{d\hat{U}(t)}{dt}\,|\psi(0)\rangle = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle \tag{1.76}$$

ce qui donne

$$i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle \tag{1.77}$$

1.3.1.2 Opérateur unitaire

Un opérateur linéaire $\hat{O}$ est unitaire s'il conserve la norme de tous les vecteurs, c'est à dire

$$\forall\,|\psi\rangle\,, \qquad |\phi\rangle = \hat{O}\,|\psi\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{1.78}$$

Propositions :

1. L'équivalent de (1.78) en géométrie euclidienne sont les transformations orthogonales (par exemples les rotations) qui conservent le produit scalaire euclidien.
2. $\hat{O}$ est unitaire si le produit scalaire hermitien est conservée par l'action de $\hat{O}$, c'est à dire
$$\forall\,|\psi\rangle\,,|\phi\rangle: \qquad \langle\phi|\psi\rangle = \left\langle\hat{O}\phi\middle|\hat{O}\psi\right\rangle \tag{1.79}$$
3. Un opérateur linéaire $\hat{O}$ est unitaire si est seulement si
$$\hat{O}^{+}\hat{O} = \hat{\mathbb{I}} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \hat{O}^{+} = \hat{O}^{-1} \tag{1.80}$$
En effet, d'aprés (1.79) on a
$$\langle\phi|\psi\rangle = \left\langle\hat{O}\phi\middle|\hat{O}\psi\right\rangle = \langle\phi|\,\hat{O}^{+}\hat{O}\,|\psi\rangle \qquad \longrightarrow \qquad \hat{O}^{+}\hat{O} = \hat{\mathbb{I}}$$
4. D'après l'équation (1.75) $\hat{U}(t)$ est un opérateur unitaire :
$$\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t) \tag{1.81}$$
En effet
$$\hat{U}^{+}(t) = \left[\exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)\right]^{+} = \exp\left(i\frac{\hat{H}^{+}t}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \hat{U}(-t)$$
donc on trouve
$$\hat{U}^{+}(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(-t)\hat{U}(t) = \exp\left(i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) = \hat{\mathbb{I}}$$

1.3.1.3 Groupe d'évolution des états quantiques dans le temps

Les propagateurs $\hat{U}(t)$ dépendent du variable continu $t \in \mathbb{R}$. Par conséquent ils constituent un ensemble d'opérateurs unitaires vérifiant les 3 propriétés suivantes :

$$\text{Loi de composition :} \quad \hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1 + t_2) \tag{1.82}$$

$$\text{Élément neutre :} \quad \hat{U}(0) = \hat{\mathbb{I}} \tag{1.83}$$

$$\text{Inverse :} \quad \left(\hat{U}(t)\right)^{-1} = \hat{U}(-t) \tag{1.84}$$

Donc ils forment un groupe dit groupe de Lie de dimension 1, car les opérateurs unitaires dépendent seulement d'une variable continue t. Ce groupe est appelé aussi groupe d'évolution dans le temps. On dit que $\hat{U}(t)$ est un élément du groupe et que $\hat{H}$ est son générateur. Ils sont reliés par

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\hat{U}(t) \tag{1.85}$$

Remarques :

- $\hat{H}$ est interprété ici comme un générateur d'évolution et dans l'opérateur de mesure comme une observable possible de la grandeur énergie. Ce double aspect est valable pour tout opérateur auto-adjoint $\hat{H}$.

- Développement limité : lorsque $t \simeq 0$, $\hat{U}(t)$ se comporte comme

$$\hat{U}(t) = \hat{\mathbb{I}} - i\frac{\hat{H}}{\hbar}t + \theta(t) \tag{1.86}$$

  dans ce cas $\hat{U}(t)$ est dit une transformation infinitésimale.

1.3.1.4 Relation d'incertitude temps-énergie

La relation $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ se déduit DIRECTEMENT des postulats et de la relation de commutation des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ c'est donc une propriété INTRINSEQUE de tout système. Il n'en est plus de même pour la relation $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ car le temps n'est pas un opérateur mais un paramètre qui a une valeur bien définie dans les équations : bien qu'on puisse le mesurer, ce n'est pas une OBSERVABLE. Les interprétations de cette relations sont multiples. On se limite ici à quelques remarques.

Etats stationnaires : Ce sont les états propres de l'énergie dont l'évolution se ramène à un simple facteur de phase global

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\hat{E}t}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle \tag{1.87}$$

Si le système est préparé dans un tel état, la valeur moyenne $\langle A\rangle$ de toute observable $\hat{A}$ ne change pas au cours du temps. Un système isolé dont l'énergie est bien définie ($\Delta E = 0$) n'évolue pas. Autrement dit, si $|\psi\rangle$ est état propre de $\hat{H}$, alors c'est un état stationnaire car il vérifie

$$|\langle\psi(t)\psi(0)\rangle| = 1 \tag{1.88}$$

et donc $\Delta E = 0$.

Evolution d'un système : Le système n'a pas d'énergie bien définie (son état ψ est par exemple une superposition de plusieurs états propres de l'énergie. D'aprés la relation générale pour toute observable $\hat{A}$ on a

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi [\hat{A}, \hat{H}] \psi \rangle \right| \tag{1.89}$$

Soit $V = \frac{d\langle A \rangle}{dt}$ la vitesse d'évolution de de $\langle A \rangle$. Le théorème d'Ehrenfest implique

$$V = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi [\hat{A}, \hat{H}] \psi \rangle \tag{1.90}$$

Conidérons $\Delta t = \frac{\Delta A}{|V|}$ comme étant le temps d'évolution de la grandeur $\hat{A}$ avec $|V| = \frac{1}{\hbar} \left| \langle \psi [\hat{A}, \hat{H}] \psi \rangle \right|$. On remplace dans (1.89) pour trouver

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.91}$$

1.3.2 Groupe des translations des états quantiques en espace

Soit $\psi(x)$ une fonction d'onde et $\psi_\lambda(x) = \psi(x - \lambda)$ est la même fonction translatée de $\lambda \in \mathbb{R}$ en espace, dans la direction x. L'opérateur de translation $\hat{T}_\lambda$ qui effectue cette transformation est définie par:

$$\left(\hat{T}_\lambda \psi \right)(x) = \psi(x - \lambda) = \psi_\lambda(x), \qquad \lambda \in \mathbb{R} \tag{1.92}$$

Exercice: vérifier que les opérateur $\hat{T}_\lambda$ forment un groupe à un paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$ d'opérateur unitaire, appelé groupe des translation des états quantiques en x.

Solution: Par anologie au cas temporel, on peut avoir la correspondance

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{p} \tag{1.93}$$
$$U(t) \longrightarrow \hat{T}_\lambda \tag{1.94}$$

Donc le générateur de groupe de translation des états quantiques en x est l'opérateur auto-adjoint impulsion

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \tag{1.95}$$

Autrement dit

$$|\psi_\lambda\rangle = \hat{T}_\lambda |\psi_0\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{d\,|\psi_\lambda\rangle}{d\lambda} = -i\frac{\hat{p}}{\hbar} |\psi_\lambda\rangle . \tag{1.96}$$

Par conséquent on obtient

$$\hat{T}_\lambda = \exp\left(-i \frac{\hat{p}\lambda}{\hbar} \right) \tag{1.97}$$

On a $\psi_\lambda(x) = \psi(x - \lambda)$ donc

$$\langle x| \frac{d}{d\lambda} |\psi_\lambda\rangle = \frac{d\psi_\lambda(x)}{d\lambda} = \frac{d\psi(x-\lambda)}{d\lambda} = -\frac{d\psi(x-\lambda)}{dx} \tag{1.98}$$

$\Longrightarrow$

$$-\frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} = \langle x| \frac{d}{d\lambda} |\psi_\lambda\rangle = \langle x| \frac{-i\hat{p}}{\hbar} |\psi_\lambda\rangle \tag{1.99}$$

$\Longrightarrow$

$$\frac{d\psi_\lambda(x)}{dx} = \langle x| \frac{i\hat{p}}{\hbar} |\psi_\lambda\rangle \tag{1.100}$$

$\Longrightarrow$
$$i\hbar\frac{d\psi_\lambda}{d\lambda} = \hat{p}\left|\psi_\lambda\right\rangle \tag{1.101}$$
qui est l'analogue a l'équation de Schrödinger. L'interprétation de l'impulsion comme générateur des translations spatiales est assez fondamentale, et valable en mécanique classique comme en mécanique quantique.

Exercice : montrer les relations suivantes :
$$\langle x|\,\hat{T}_\lambda = \langle x-\lambda| \tag{1.102}$$
$$\hat{T}_\lambda\,|x\rangle = |x+\lambda\rangle \tag{1.103}$$

1.3.3 Groupe des translations en impulsion

Soit $\hat{B}_\mu$ l'opérateur qui translate de la fonction d'onde en représentation d'impulsion
$$\check{\psi}_\mu(p) = (\hat{B}_\mu\check{\psi})(x) = \check{\psi}(p-\mu) \tag{1.104}$$
Comme $p = mv$ (en mécanique classique), l'opérateur $\hat{B}_\mu$ consiste à changer la vitesse par une constante. Cela s'appelle aussi un BOOST. Ce changement intervient lors d'un changement de référentiel Galiléen :
$$x^{'} = x + vt \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{dx^{'}}{dt} = \frac{dx}{dt} + v, \qquad v = \text{cte}. \tag{1.105}$$

Exercice: Montrer que $\hat{B}_\mu$ forment un groupe à un paramètre $\mu \in \mathbb{R}$ d'opérateurs unitaires et que l'opérateur position $(-\hat{x})$ est leur générateur:
$$\hat{B}_\mu = \exp\left(-i\frac{(-\hat{x})\mu}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{(\hat{x})\mu}{\hbar}\right) \tag{1.106}$$
$$\frac{d\left|\check{\psi}_\mu\right\rangle}{d\mu} = \left(-i\frac{(-\hat{x})}{\hbar}\right)\left|\check{\psi}_\mu\right\rangle \tag{1.107}$$

1.3.4 Générateurs en mécanique classique

En mécanique classique de Hamilton la situation est la même. En effet, un état est un point (x,p) dans l'espace de phase.

- Evolution temporelle : Si le point $(x(t),p(t))$ évolue en temps, alors il satisfait l'équation d'évolution de Hamilton :
$$\left\{\begin{array}{l} \dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{dp} \\ \dot{p} = \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{dx} \end{array}\right. \qquad \Longleftrightarrow \qquad \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{dp} \\ -\frac{\partial H}{dx} \end{pmatrix} \tag{1.108}$$
qui est l'analogue classique de l'équation de Schrödinger. Elle permet de dire que la fonction de Hamilton H est le générateur de l'évolution temporelle.

- Les translations en position :
$$(x_\lambda, p_\lambda) = (x_0+\lambda, p_0) \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{dx_\lambda}{d\lambda} = 1, \qquad \frac{dp_\lambda}{d\lambda} = 0. \tag{1.109}$$
En général on peut écrire
$$\frac{d}{d\lambda}\begin{pmatrix} x_\lambda \\ p_\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{dp} \\ -\frac{\partial G}{dx} \end{pmatrix} \tag{1.110}$$
où le générateur est la fonction impulsion $G(x,p) = p$.

- Les translations en impulsion, le générateur est la fonction $G(x,p) = -x$.

Résume :

- L'opérateur $(-\hat{x})$ est le générateur des translations des fonctions d'ondes en impulsion.
- L'opérateur $\hat{p}$ est le générateur d'évolution des fonctions d'ondes en espace.
- L'opérateur $\hat{H}$ est le générateur d'évolution des fonctions d'ondes en temps.

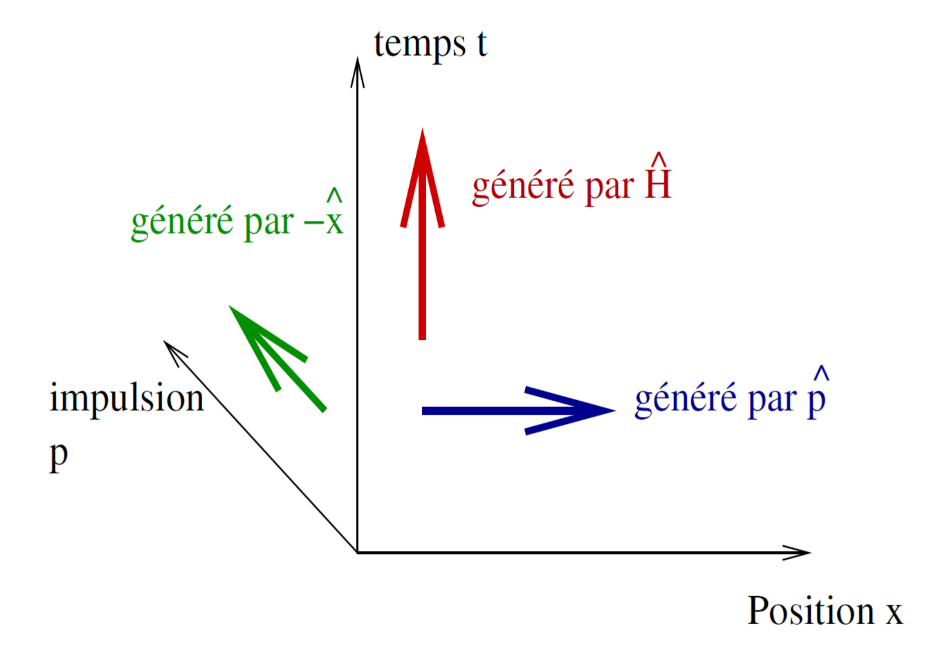


Fig 1.1: Résumé de l'action des générateurs des translations dans l'espace (de phase)

NB : il y a une différence entre les translations dans l'espace de phase en mécanique classique et quantique. Ça est due à la non commutativité $[\hat{q},\hat{p}] \neq 0$ et par conséquent $[\hat{T}_\lambda, \hat{B}_\mu] \neq 0$ en général. Dans la suite, on verra que le groupe des translations quantiques dans l'espace de phase (groupe de Weyl-Heisenberg) est un groupe de Lie de dimension 3. En mécanique classique le groupe des translations dans l'espace de phase est un groupe de Lie commutatif de dimension 2.

Chapitre 2

Oscillateur Harmonique

2.1 Potentiel harmonique

En général, il est impossible de résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel quelconque $V(x)$, mais cela est possible pour certain type de potentiel. Dans la suite on va considérer le potentiel harmonique défini par

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{2.1}$$

avec $k = $ cte. Le Hamiltonien correspond est

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 \tag{2.2}$$

Si une particule, se déplaçant à une dimension, subit un champ de force dérivant d'un potentiel $F(x) = -\frac{dV}{dx}$, qui se trouve près d'une position d'équilibre (soit $x = 0$), alors on a

$$F(0) = -\frac{dV}{dx}(0) = 0. \tag{2.3}$$

En plus, si cette équilibre est stable, alors

$$\frac{dF}{dx}(0) = \frac{dF}{dx}\Big|_{x=0} = \left(-\frac{d^2V}{dx^2}\right)(0) < 0. \tag{2.4}$$

Dans ce cas le mouvement de la particule reste au voisinage de cette position d'équilibre. Donc on peut approximer la fonction potentielle par son développement limité en $x \simeq 0$:

$$V(x) = V(0) + x\frac{dV}{dx}(0) + \frac{1}{2}x^2\frac{d^2V}{dx^2}(0) + \Theta(x^2) = \frac{1}{2}kx^2 + \Theta(x^2) \tag{2.5}$$

avec $k = \frac{d^2V}{dx^2}(0)$ et $V(0) = 0$ par choix de l'échelle d'énergie. Cette situation est très courante, car à "basse" température, les particules ont tendance à se mettre près de leur position d'équilibre stable qui est la position de plus basse énergie. Pour ces raisons, l'approximation Harmonique est très utile et fondamentale en physique.

Les équations de mouvement correspondantes à le Hamiltonien classique $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ sont données par les équation de Hamilton

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \tag{2.6}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx. \tag{2.7}$$

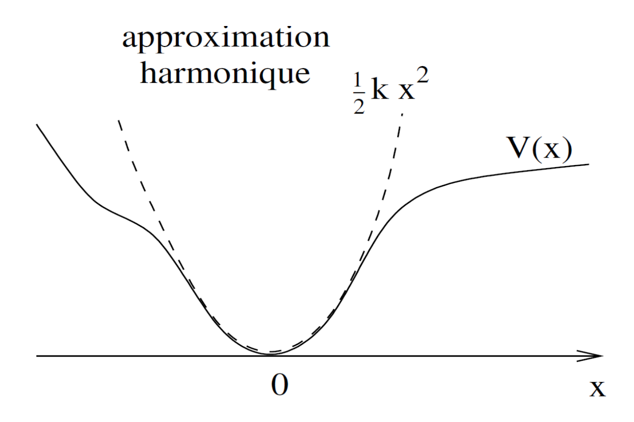


Fig 2.1: Approximation harmonique près de la position d'équilibre stable.

Elles sont linéaires en terme des variables x et p. Pour cela, on parle de l'approximation linéaire du mouvement. Plus généralement, les équations de mouvement sont linéaires lorsque le Hamiltonien est quadratique en x et p. A partir de Eqs. (2.6) et (2.7), on trouve l'équation différentielle de second ordere

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \tag{2.8}$$

Donc la solution de cette équation

$$x(t) = x(0)\sin(\omega t + \varphi_0) \tag{2.9}$$

montre que la particule a un mouvement d'oscillation à la fréquence ou pulsation

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{2.10}$$

avec $x(0)$ amplitude du mouvement et $\varphi_0 \in [-\pi, \pi]$ est la phase. Eq. (2.9) est indépendante de l'énergie et elle est purement sinusoïdale. Le terme "Harmonique" vient de cette propriété.

Remarque : pour un problème à plusieurs dimensions ou plusieurs degrés de liberté, cela est encore valable.

Exemples :

- Les équations de Maxwell sont linéaires par rapport aux champs $\overrightarrow{E}$ et $\overrightarrow{B}$. Ainsi la dynamique du champ de Maxwell est harmonique et l'analyse de cette section sera directement applicable pour comprendre la nature quantique du champ électromagnétique et le concept de photon (états stationnaires quantiques des oscillations du champ).

- On peut appliquer l'approximation harmonique pour les ondes de vibration d'un solide pour les faibles amplitudes. Les petites vibrations du solide sont alors décrites par un Hamiltonien qui est la somme d'oscillateurs harmoniques indépendants. Les phonons sont les états stationnaires quantiques de ses oscillations.

2.2 Méthode Algébrique

On va utiliser une démarche générale pour determinee le spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique. Cette méthode est applicable aux problèmes possédant une symétrie dynamique.

2.2.1 Changements

Pour résoudre algébriquement l'équation au valeurs propres, on commence par le changement d'opérateur suivant :

$$\hat{Q} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \hat{x} \tag{2.11}$$

$$\hat{P} = \left(\frac{1}{\hbar m\omega}\right)^{1/2} \hat{p} \tag{2.12}$$

Notons que $\hat{Q}$ et $\hat{P}$ sont des opérateurs sans dimension. En terme de ces nouveux opérateurs $\hat{H}$ (2.2) s'écrit comme

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right) \tag{2.13}$$

On montre que $\hat{Q}$ et $\hat{P}$ satisfaisant la relation de commutation :

$$\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = i\mathbb{I} \tag{2.14}$$

ainsi que les relations

$$\left[\hat{H}, \hat{Q}\right] = -i\hbar\omega\hat{P} \tag{2.15}$$

$$\left[\hat{H}, \hat{P}\right] = -i\hbar\omega\hat{Q} \tag{2.16}$$

Complément :

- D'après Eqs. (2.14), (2.15) et (2.16) les commutateurs de deux opérateurs de l'ensemble ($\hat{H}$, $\hat{Q}$, $\hat{P}$, $\hat{\mathbb{I}}$) est une combinaison linéaire de ces opérateurs. L'espace engendré par ces opérateurs est dit stable vis à vis de l'opération de commutation. L'algèbre de Lie de l'oscillateur Harmonique, noté Θ est l'espace vectoriel engendré par ($\hat{H}$, $\hat{Q}$, $\hat{P}$, $\hat{\mathbb{I}}$), c'est à dire par toutes les combinaisons linéaires possibles. C'est un espace vectoriel de dimension 4, qui est stable par l'opération de commutation. Autrement dit, $\forall \hat{A} \in \Theta$ s'écrit

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{H} + \delta\hat{\mathbb{I}} \tag{2.17}$$

  avec α, β, γ, $\delta \in \mathbb{R}$. Si $\hat{A}$, $\hat{B} \in \Theta$ alors $\frac{1}{i}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \in \Theta$.

- En général, une algèbre de Lie d'opérateurs est un ensemble d'opérateurs auto-adjoints formant un espace vectoriel réel de dimension finie n et stable par l'opération de commutation. Si $\boldsymbol{A}$ une telle algèbre de dimension n, cela signifie, qu'il existe des opérateurs auto-adjoints $\hat{A}_1$, $(\hat{A}_2, \cdots, \hat{A}_n)$, indépendants, formant une base de $\boldsymbol{A}$, et que $\forall \hat{A} \in \boldsymbol{A}$ s'écrit comme une combinaison linéaire à coefficients réels :

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{n} a_i \hat{A}_i, \qquad a_i \in \mathbb{R} \tag{2.18}$$

  $\forall \hat{A}, \hat{B} \in \boldsymbol{A}$, $\frac{1}{i}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \frac{1}{i}\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) \in \boldsymbol{A}$.

- L'algèbre est caractérisée par sa dimension n et par les commutateurs des éléments de base $\hat{A}_i$, telle que :

$$\frac{1}{i}\left[\hat{A}_i, \hat{B}_j\right] = \sum_{k=1}^{n} C_{ijk}\hat{A}_k, \qquad C_{ijk} \in \mathbb{R}. \tag{2.19}$$

- Deux algèbres de Lie $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{A}^{'}$ sont dites isomorphes (i.e. équivalentes) s'il existe une bijection $\varphi : \boldsymbol{A} \longrightarrow \boldsymbol{A}^{'}$ telle que :

  1- φ soit une application linéaire (i.e. préserve les combinaisons linéaires).

  2- φ préserve les commutateurs : si $\frac{1}{i}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{C}$ alors $\left[\varphi(\hat{A}), \varphi(\hat{B})\right] = \varphi(\hat{C})$

- On peut considérer aussi les combinaisons à coefficients complexes. Il s'agit alors de l'algèbre de Lie complexifiée.

2.2.2 Opérateurs d'annihilation et création

Pour diagonaliser le Hamiltonien en haut, on introduit deux opérateurs appelés opérateurs d'annihilation et création. Il s'agit de

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{Q} + i\hat{P}\right) \tag{2.20}$$

$$a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{Q} - i\hat{P}\right) \tag{2.21}$$

où $a^{\dagger}$ est l'opérateur adjoint de a. Ils vérifient

$$\left[a, a^{\dagger}\right] = \hat{\mathbb{I}} \tag{2.22}$$

En effet :

$$\left[a, a^{\dagger}\right] = \frac{1}{2}\left(\left[\hat{Q}, -i\hat{P}\right] + \left[i\hat{P}, \hat{Q}\right]\right) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \mathbb{I}) = \hat{\mathbb{I}}$$

Eqs. (2.20) et (2.21) impliquent

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^{\dagger}) \tag{2.23}$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^{\dagger} - a) \tag{2.24}$$

Injecton ces deux équations dans la forme de $\hat{H}$, on trouve

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\hat{\mathbb{I}}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{\mathbb{I}}\right) \tag{2.25}$$

avec $\hat{N} = a^{\dagger}a$ dit opérateur nombre.

On montre les relations suivantes :

$$\left[a, a^{\dagger}\right] = \hat{\mathbb{I}} \tag{2.26}$$

$$\left[a, \hat{\mathbb{I}}\right] = 0 \tag{2.27}$$

$$\left[a^{\dagger}, \hat{\mathbb{I}}\right] = 0 \tag{2.28}$$

$$\left[\hat{N}, a\right] = -a \tag{2.29}$$

$$\left[\hat{N}, a^{\dagger}\right] = a^{\dagger} \tag{2.30}$$

Les 4 opérateurs $(\hat{N}, a^{\dagger}, a, \mathbb{I})$ forment une autre base de la même algèbre caracterisée par Eq. (2.17). La forme (2.26)-(2.30) appelée décomposition de Cartan. Cette forme permet de calculer le spectre de l'opérateur $\hat{N}$ et donc en déduire celui de $\hat{H}$.

Les opérateurs a et $a^{\dagger}$ qui ne sont pas hermitiens, ont la propriété de diminuer et d'augmenter respectivement la valeur propre de $\hat{N}$, donc aussi de $\hat{H}$. Pour cette raison, a et $a^{\dagger}$ sont appelés opérateurs d'échelle.

2.2.3 Etats et valeurs propres

Proposition : Le spectre d'énergie de l'opérateur $\hat{N}$ est formé par

$$\hat{N}\,|n\rangle = n\,|n\rangle\,, \qquad n \in \mathbb{N}. \tag{2.31}$$

et les es opérateurs a et $a^\dagger$ agissent sur l'état $|n\rangle$ comme

$$a^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,, \qquad n \geqslant 0 \tag{2.32}$$
$$a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,, \qquad n \geqslant 1 \tag{2.33}$$

Chaque état normalisé $|n\rangle$ s'exprime à partir de l'état $|0\rangle$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\,|0\rangle \tag{2.34}$$

où l'état $|0\rangle$ est défini par

$$a\,|0\rangle = 0 \tag{2.35}$$

et sa fonction d'onde normaliseé dans la "représentation Q" est une fonction gaussienne

$$\langle Q|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-\frac{1}{2}Q^2} \tag{2.36}$$

Par conséquent, le spectre de $\hat{H}$ est

$$\hat{H}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \tag{2.37}$$
$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{2.38}$$

La relation de fermeture dans la base $\{|n\rangle\}$ s'écrit comme

$$\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\,\langle n| = \mathbb{I}. \tag{2.39}$$

Preuve : On cherche une base orthonormée $\{|\nu\rangle\}$ de l'espace de Hilbert de le Hamiltonien H formeé par le vecteur propres de $\hat{N}$, tel que

$$\hat{N}\,|\nu\rangle = \nu\,|\nu\rangle\,, \qquad \nu \in \mathbb{R} \tag{2.40}$$

Eq. (2.33) : On commence par le calcul de l'état $\hat{N}(a\,|\nu\rangle)$, en effect,

$$\hat{N}(a\,|\nu\rangle) = a(\hat{N}-\mathbb{I})\,|\nu\rangle = (\nu-1)(a\,|\nu\rangle) \tag{2.41}$$

ce qui implique que si $a\,|\nu\rangle \neq 0$, alors $a\,|\nu\rangle$ est un état (vecteur) propre de $\hat{N}$ associé au vecteur propre $(\nu-1)$. Définisson l'état normalisé $|\nu-1\rangle$ par

$$a\,|\nu\rangle = c\,|\nu-1\rangle \qquad \text{avec} \quad c \in \mathbb{R}^+ \tag{2.42}$$

avec c est une constante de normalisation telle que :

$$|c|^2 = \|c\,|\nu-1\rangle\|^2 = \|a\,|\nu\rangle\|^2 = \langle\nu|\,a^\dagger a\,|\nu\rangle = \nu \tag{2.43}$$

car la base est orthonormée et donc $\langle\nu|\nu\rangle \neq 0$. Pour $\nu > 0$ on a $c = \sqrt{\nu}$, il s'ensuit que

$$a\,|\nu\rangle = \sqrt{\nu}\,|\nu-1\rangle \tag{2.44}$$
$$\nu = 0 \implies a\,|0\rangle = 0. \tag{2.45}$$

Eq. (2.32) : On a

$$a^\dagger|\nu-1\rangle = \frac{a^\dagger a}{\sqrt{\nu}}|\nu\rangle = \frac{\hat{N}}{\sqrt{\nu}}|\nu\rangle = \sqrt{\nu}|\nu\rangle. \tag{2.46}$$

Entier ν : Pour montrer que ν est un entier, on suppose que ν est non entier et qu'il existe un entier n tel que $n < \nu < n+1$. A l'ordre n on a

$$Na^n|\nu\rangle = (\nu-n)a^n|\nu\rangle \tag{2.47}$$

avec $\nu - n \geqslant 0$ car la norme est toujours positive $|a|\nu\rangle|^2 = \langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \nu \geqslant 0$. Maintenant, on pousse le calcul à l'ordre $n+1$

$$Na^{n+1}|\nu\rangle = (\nu-(n+1))a^{n+1}|\nu\rangle \tag{2.48}$$

ce qui implique

$$\nu-(n+1)\geqslant 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \nu \geqslant n+1 \tag{2.49}$$

c'est une contradiction avec l'hyposthèse donc ν doit être entier.

On dérive les fonctions d'onde $\psi_n(x)$ associées aux états $|n\rangle$ comme suit. Rappellons que $\hat{Q} = \alpha\hat{x}$ avec $\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$. Donc on peut écrire l'état comme

$$|Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}|x\rangle \tag{2.50}$$

La projection des états $|n\rangle$ sur la base représentation position donne

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \sqrt{\alpha}\langle Q|n\rangle \tag{2.51}$$

En particulier, on a

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \sqrt{\alpha}\langle Q|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{2.52}$$

qui est un paquet d'onde Gaussien avec $x_0 = 0$, $p_0 = 0$ et de largeur $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

2.3 États Cohérents

Rappelons que l'état fondamental de l'oscillateur harmonique est un paquet d'onde Gaussien avec $x_0 = 0$, $p_0 = 0$ et de largeur $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$. On le note comme

$$|0\rangle = |x_0 = 0, p_0 = 0, \sigma\rangle \tag{2.53}$$

2.3.1 Expression algébrique d'un paquet d'onde

Proposition :

A partir des Eqs. (1.97) et (1.106) du Chapitre 1, on peut définir les opérateurs de translation en position et en impulsion correspondants à l'oscillateur harmonique

$$\hat{T}_Q = e^{-iQ\hat{P}} \tag{2.54}$$
$$\hat{B}_P = e^{iP\hat{Q}} \tag{2.55}$$

Donc le paquet d'onde $|Q,P\rangle$ défini par Eq. (1.17) dans Chapitre 1, s'obtient à partir de l'état $|0\rangle$ par l'action de ces opérateurs

$$|Q,P\rangle = \hat{B}_P\hat{T}_Q|0\rangle \tag{2.56}$$

On introduit un point de l'espace de phase (Fig 2.2)

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \in \mathbb{C} \tag{2.57}$$

pour écrire le paquet d'onde comme

$$|Q, P\rangle = e^{i\frac{PQ}{2}}\hat{D}(z)|0\rangle \tag{2.58}$$

où $\hat{D}(z)$ est dit opérateur déplacement sur l'espace de phase tel que

$$\hat{D}(z) = e^{iP\hat{Q}-iQ\hat{P}} = e^{za^{\dagger}-\bar{z}a} \tag{2.59}$$

Il est plus commode de défini un état par

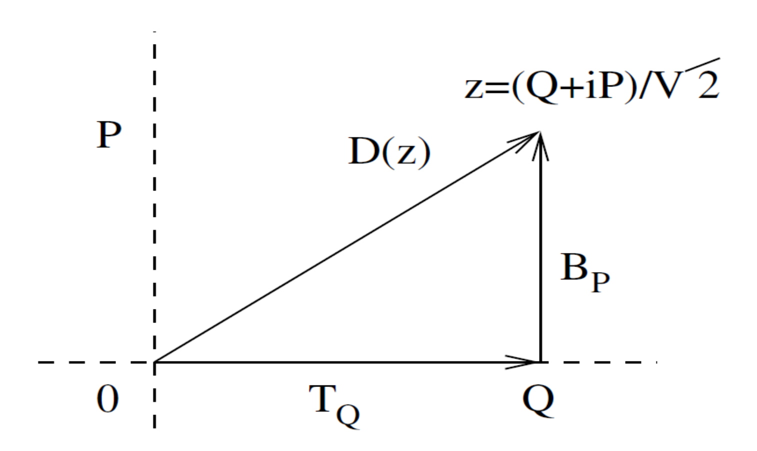


Fig 2.2: Schéma du déplacement de z dans l'espace de phase.

$$|z\rangle = e^{-i\frac{PQ}{2}}|Q, P\rangle = \hat{D}(z)|0\rangle \tag{2.60}$$

appelé état cohérent.

Preuve :

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{B}_{p_0}\hat{T}_{x_0}|0\rangle &= e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}\langle x|\hat{T}_{x_0}|0\rangle \\ &= e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}\langle x - x_0|0\rangle \\ &= e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}\left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-x_0)^2} \\ &= \langle x|x_0, p_0\rangle \end{aligned} \tag{2.61}$$

En suite, on a

$$e^{-i\frac{PQ}{2}}\hat{B}_Q\hat{T}_Q = e^{iP\hat{Q}-iQ\hat{P}} = e^{za^{+}-\bar{z}a} \tag{2.62}$$

avec $\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = i\mathbb{I}$, $\left[a, a^{\dagger}\right] = \mathbb{I}$.

2.3.2 Evolution d'un paquet d'onde Gaussien

Supposons que à l'instant $t = 0$, la fonction d'onde est un paquet d'onde Gaussien $|\psi(0)\rangle = |z_0\rangle$ avec $z_0 \in \mathbb{C}$, donc à l'instant t d'après Eq. (1.74) on a

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|z_0\rangle \tag{2.63}$$

avec l'opérateur evolution est

$$\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}. \tag{2.64}$$

Donc pour l'oscillateur harmonique, on a

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{n}\omega t} \tag{2.65}$$

avec l'opérateur $\hat{n} = \hat{N} + \frac{1}{2}\mathbb{I}$. Soit $\hat{R}(\theta)$ est un opérateur de rotation dans l'espace de phase d'angle θ, tel que

$$\hat{R}(\theta) = e^{-i\hat{n}\theta} \tag{2.66}$$

donc on voix que

$$\hat{U}(t) = \hat{R}(\omega t) \tag{2.67}$$

Propriété : On a la relation suivante :

$$\hat{R}(\theta)\hat{D}(z) = \hat{D}\left(e^{-i\theta}z\right)\hat{R}(\theta) \tag{2.68}$$

qui est vraie également en mécanique classique.

Proposition :

$$\psi(t) = \hat{U}(t)\,|z_0\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\,|z(t)\rangle\,, \qquad z(t) = z_0 e^{-i\omega t} \tag{2.69}$$

Preuve : On a

$$|\psi(t)\rangle = \hat{R}(\omega t)D(z_0)\,|0\rangle = \hat{D}(e^{-i\omega t}z_0)\hat{R}(\omega t)\,|0\rangle$$

or

$$\hat{R}(\theta)\,|0\rangle = e^{-i\theta/2}e^{-ia^\dagger a\theta}\,|0\rangle$$

et puisque

$$a^\dagger a\,|0\rangle = 0$$

donc

$$e^{-ia^\dagger a}\,|0\rangle = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-ia^\dagger a\theta\right)^n|0\rangle = |0\rangle$$

ce qui donne

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2}D(e^{-i\omega t}z_0)\,|0\rangle = e^{-i\omega t/2}\,|z(t)\rangle$$

avec $z(t) = e^{-i\omega t}z_0$.

Conclusion : Un paquet d'onde est également appelé un état cohérent ou plus exactement état cohérent du groupe de l'oscillateur harmonique.

2.4 Algèbres et Groupes

2.4.1 Weyl-Heisenberg

Définition :

Les opérateurs $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{\mathbb{I}})$ forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 3 dite algèbre de Weyl-Heisenberg, notée $\mathcal{W}$. Un élément de $\mathcal{W}$ peut s'écrire comme combinaison linéaire

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{\mathbb{I}}, \qquad (\alpha, \beta, \gamma) \in \mathbb{R}^3 \tag{2.70}$$

Il est claire que $\hat{A}$ est un opérateur auto-adjoint. Noter que $(a, a^+, \hat{\mathbb{I}})$ forment une autre base de la même algèbre $\mathcal{W}$, mais avec des coefficients complexes.

Proposition : Le groupe de Weyl-Heisenberg noté W est défini par ces opérateurs unitaires tels que

$$\hat{U} = e^{-i\hat{A}} = e^{-i(\alpha\hat{Q}+\beta\hat{P}+\gamma\hat{\mathbb{I}})} \in W \tag{2.71}$$

de plus

$$\hat{U} = e^{-i\gamma+i\alpha\beta/2}e^{-i\alpha\hat{Q}}e^{-i\beta\hat{P}} = e^{-i\gamma+i\alpha\beta/2}\hat{B}_{-\alpha}\hat{T}_{\beta} \tag{2.72}$$

donc $\hat{U}$ est un opérateur de translation $(\beta, -\alpha)$ dans l'espace de phase.

Exercice (Preuve) : Montrer que

- W est un groupe.
- La relation (2.72).

2.4.2 Oscillateur

L'ensemble $(\hat{n}, \hat{Q}, \hat{P}, \hat{\mathbb{I}})$ forment une base d'une algèbre de Lie de dimension 4, appelée algèbre de l'oscillateur harmonique, notée $\mathcal{O}$. Un élement $\hat{A} \in \mathcal{O}$ est un opérateur auto-adjoint, il s'écrit

$$\hat{A} = \alpha\hat{Q} + \beta\hat{P} + \gamma\hat{\mathbb{I}} + \theta\hat{n} \in \mathcal{O}, \qquad (\alpha, \beta, \gamma, \theta) \in \mathbb{R}^4 \tag{2.73}$$

Proposition : Le groupe correspond est le groupe de l'oscillateur harmonique noté O tel que son élément est donné par

$$\hat{U} = e^{-i\hat{A}} \in \Theta \tag{2.74}$$

On montre la relation

$$\hat{U} = e^{-i\gamma}e^{-i\alpha\hat{Q}}e^{-i\beta\hat{P}}e^{-i\theta\hat{n}} = e^{-i\gamma}\hat{B}_{-\alpha}\hat{T}_{\beta}\hat{R}_{\theta} \tag{2.75}$$

qui s'interprète donc comme un opérateur de rotation de l'angle θ suivit d'une translation de $(\beta, -\alpha)$ dans l'espace de phase.

Exercice (Preuve) : Montrer que

- O est un groupe.
- La relation (2.75).

Chapitre 3

Moment Cinetique

3.1 Motivation

Dans le but d'interprétater le spectre de l'atome d'hydrogène, Bhor a proposé un modèle basé sur le postulat suivant. Il a supposé que les électrons tournent autour du noyau dans les niveaux d'énergie discrets et ils peuvent gagner ou perdre de l'énergie en sautant entre les niveaux d'énergie, donnant un rayonnement de fréquence ν selon la formule

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu \tag{3.1}$$

où $\nu = \frac{1}{T}$ avec T est la période de l'orbite, comme dans la mécanique classique.

Les études ultérieures ont montrée que le modèle de Bohr est faux et parsuit ne décrit pas correctement l'atome d'hydrogène. En effet, l'électron ne se trouve pas sur des orbites circulaires autour du noyau. En effet une description où l'électron aurait à chaque instant une position et une vitesse bien déterminée serait en contradiction avec le principe de Heisenberg. En conclusion, Bohr n'a pas commencé par la quantification du moment angulaire. On va voir la quantification du moment angulaire permet de résoudre le problème de Bohr.

On considère une particule plangée dans un potentiel central (potentiel qui ne dépend que de la distance à un point donné) décrite par le Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{r}), \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{3.2}$$

- En mécanique classique, la solution de ce problème est basée sur le fait que le moment cinétique par rapport un point O d'une particule de position $\vec{r}$ et d'impulsion $\vec{p}$

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} \tag{3.3}$$

est une quantité conservée. En effet, on a

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{L}}{\mathrm{dt}} &= \frac{d\vec{r}}{\mathrm{dt}} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \frac{d\vec{p}}{\mathrm{dt}} \\ &= \underbrace{\frac{\vec{p}}{m} \wedge \vec{p}}_{=0} + \vec{r} \wedge \vec{F} \end{aligned} \tag{3.4}$$

Puisque $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V$ est dirigée suivant $\vec{r}$ lorsque $V = V(r)$ donc

$$\frac{d\vec{L}}{\mathrm{dt}} = \vec{0} \qquad \Longrightarrow \qquad \vec{L} = \text{constante} \tag{3.5}$$

- En mécanique quantique, on a la même chose sauf que le moment cinétique est devenu un opérateur.

3.2 Realtion Entre Moment Cinétique Et Hamiltonien

3.2.1 Relation avec opérateurs position et impulsion

On veut déterminer la relation qui existe entre l'opérateur moment cinétique et le Hamiltonien donné par Eq. (3.2). On commence par rappeller que dans un espace à trois dimensions, l'opérateur moment cinétique $\overrightarrow{\hat{L}} = \left(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\right)$ est

$$\overrightarrow{\hat{L}} = \overrightarrow{\hat{r}} \wedge \overrightarrow{\hat{p}} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

Par exemple on peut avoir les relations de commutation suivantes entre l'opérateur moment cinétique L_x et les opérateurs positions $(\hat{x}, \hat{y})$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{x}\right] = 0 \tag{3.7}$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{y}\right] = \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{y}\right] = -\hat{z}\left[\hat{p}_y, \hat{y}\right] = i\hbar\hat{z} \tag{3.8}$$

qui peuvent être généralisées comme suit

$$\left[\hat{L}_j, \hat{x}_k\right] = i\hbar\epsilon^{jkl}\hat{x}_l \tag{3.9}$$

où la sommation est faite sur les indices répétés avec $j, k, l = x, y, z$. Le symbole de Levi-Civita est défini par

$$\epsilon^{jkl} = \begin{cases} \epsilon^{123} = \epsilon^{231} = \epsilon^{312} = 1, & \text{permutations paires de 123} \\ \epsilon^{132} = \epsilon^{321} = \epsilon^{213} = -1, & \text{permutations impaires de 123} \\ \epsilon^{jkl} = 0, & \text{dans les autres cas} \end{cases} \tag{3.10}$$

Egalement on peut faire la même chose avec l'opérateur impulsion. Il s'agit d'avoir les relations de commutations suivantes :

$$\left[\hat{L}_x, \hat{p}_x\right] = 0 \tag{3.11}$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{p}_y\right] = \left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_y\right] = i\hbar\hat{p}_z \tag{3.12}$$

On général, on peut écrire

$$\left[\hat{L}_j, \hat{p}_k\right] = i\hbar\epsilon^{jkl}\hat{p}_l \tag{3.13}$$

3.2.2 Realation avec Hamiltonien

On montre que l'opérateur moment cinétique commute avec le Hamiltonien Eq. (3.2). Pour cela, on commence par le potentiel et donc écrire le commutateur

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_z, V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})\right]\varphi &= \left[\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})\right]\varphi \\ &= \hat{x}\left[\hat{p}_y, V\right]\varphi - \hat{y}\left[\hat{p}_x, V\right]\varphi \\ &= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial y}\varphi - y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x}\varphi \\ &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial V}{\partial y} - y\frac{\partial V}{\partial x}\right)\varphi \end{aligned} \tag{3.14}$$

Puisque $V(\hat{x},\hat{y},\hat{z})\varphi = V(r)\varphi$ et $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, donc on a

$$x\frac{\partial V}{\partial y} - y\frac{\partial V}{\partial x} = x\frac{\partial V}{\partial r}\frac{y}{r} - y\frac{\partial V}{\partial r}\frac{x}{r} = 0$$

ce qui implique que $\hat{L}_z$ commute avec V. De la même manière, on montre que $\hat{L}_x$ et $\hat{L}_y$ commutent avec V. Il s'ensuit que $\overrightarrow{\hat{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ commute avec V. Miantenent il reste à montrer la commutation avec $\overrightarrow{\hat{p}}^2$ qui peut se faire en utilisant Eq. (3.13) et donc

$$\left[\hat{L}_z,\hat{p}_x\right] = [\hat{x},\hat{p}_x]\,\hat{p}_y = i\hbar\hat{p}_y \implies \left[\hat{L}_z,\hat{p}_x^2\right] = i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_x + i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y = 2i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y \quad (3.15)$$

$$\left[\hat{L}_z,\hat{p}_y\right] = -i\hbar\hat{p}_x \implies \left[\hat{L}_z,\hat{p}_y^2\right] = -2i\hbar\hat{p}_x\hat{p}_y \quad (3.16)$$

$$\left[\hat{L}_z,\hat{p}_z\right] = 0 \implies \left[\hat{L}_z,\hat{p}_z^2\right] = 0 \quad (3.17)$$

ce qui implique

$$\left[\hat{L}_z,\overrightarrow{\hat{p}}^2\right] = 0 \quad (3.18)$$

et par suite $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \overrightarrow{\hat{L}}^2$ commutent avec $\overrightarrow{\hat{p}}^2$. En conlusion les opérateurs $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z, \overrightarrow{\hat{L}}^2$ commutent avec le Hamiltonien $\hat{H}$:

$$[\hat{L}_x,\hat{H}] = [\hat{L}_x,\hat{H}] = [\hat{L}_x,\hat{H}] = [\overrightarrow{\hat{L}}^2,\hat{H}] = 0 \quad (3.19)$$

Dans la suite on va établir une relation entre l'opérateur $\hat{L}^2$ et Hamiltonien $\hat{H}$. En effect, effectuons le calcul suivant :

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x^2 &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^2 \\
&= \hat{y}^2\hat{p}_z^2 + \hat{z}^2\hat{p}_y^2 - \hat{y}\underbrace{\hat{p}_z\hat{z}}_{\hat{z}\hat{p}_z - i\hbar}\hat{p}_y - \hat{z}\underbrace{\hat{p}_y\hat{y}}_{\hat{y}\hat{p}_y - i\hbar}\hat{p}_z \\
&= \hat{y}^2\hat{p}_z^2 + \hat{z}^2\hat{p}_y^2 + i\hbar\hat{y}\hat{p}_y + i\hbar\hat{z}\hat{p}_z - 2\hat{y}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z \quad (3.20)
\end{aligned}$$

qui conduit au resultat suivant

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{\hat{L}}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\
&= (\hat{x}^2+\hat{y}^2)\hat{p}_z^2 + (\hat{y}^2+\hat{z}^2)\hat{p}_x^2 + (\hat{z}^2+\hat{x}^2)\hat{p}_y^2 + 2i\hbar(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z) \\
&\quad -2\hat{y}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - 2\hat{x}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_y - 2\hat{z}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_x \\
&= \overrightarrow{\hat{r}}^2\overrightarrow{\hat{p}}^2 - \hat{z}^2\hat{p}_z^2 - \hat{x}^2\hat{p}_x^2 - \hat{y}^2\hat{p}_y^2 + 2i\hbar\overrightarrow{\hat{r}}\cdot\overrightarrow{\hat{p}} - 2\hat{y}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - 2\hat{x}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_y - 2\hat{z}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_x \\
&= \overrightarrow{\hat{r}}^2\overrightarrow{\hat{p}}^2 - \left(\overrightarrow{\hat{r}}\cdot\overrightarrow{\hat{p}}\right)^2 + 2i\hbar\overrightarrow{\hat{r}}\cdot\overrightarrow{\hat{p}} \quad (3.21)
\end{aligned}$$

Rappellons que

$$\begin{aligned}
\left(\overrightarrow{r}\cdot\overrightarrow{\nabla}\right)f &= x\frac{\partial f}{\partial x} + y\frac{\partial f}{\partial y} + z\frac{\partial f}{\partial z} \\
&= x\frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + y\frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y} + z\frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial f}{\partial r} \\
&= x\frac{\partial f}{\partial r}\frac{x}{r} + y\frac{\partial f}{\partial r}\frac{y}{r} + z\frac{\partial f}{\partial r}\frac{z}{r} \\
&= r\frac{\partial f}{\partial r} \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Regroupons tout pour écrire

$$\hat{\vec{p}}^2 = \frac{1}{r^2}\hat{\vec{L}}^2 - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{3.23}$$

On remplace dans la forme de $\hat{H}$

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r)} \tag{3.24}$$

Puisque $\left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}\right] = 0$, donc ils possèdent uns base commune formèe par ses vecteurs propres et le problème revient à trouver

- Les valeurs propres et les fonctions propres de $\hat{\vec{L}}^2$.
- Les valeurs propres et les vecteus propres de l'opérateur $\hat{H}$.

3.2.3 Relations de commutations entre eux

Notre objectif est de déterminer les valeurs et vecteurs propres de l'opérateur $\hat{\vec{L}}^2$. Pour cela, on va utiliser l'approach algébrique puisque on a les relation de commutation entre les composantes de l'opérateur $\hat{L}^2$. En effet, on montre

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] \\
&= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\
&= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y \\
&= i\hbar\hat{L}_z
\end{aligned} \tag{3.25}$$

qui peut être généralisée comme suit

$$\boxed{\left[\hat{L}_j, \hat{L}_k\right] = i\hbar\epsilon^{jkl}\hat{L}_l \qquad \Longleftrightarrow \qquad \vec{L}\wedge\vec{L} = i\hbar\vec{L}} \tag{3.26}$$

Egalement on a

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{\vec{L}}^2\right] &= \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2\right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2\right] \\
&= \hat{L}_y i\hbar\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y - \hat{L}_z i\hbar\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z \\
&= 0
\end{aligned} \tag{3.27}$$

On conclut que $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ et $\hat{L}_z$ commutent avec $\hat{\vec{L}}^2$.

3.3 Generalisation

Par définition on appelle moment cinétique $\vec{J}$ toute observable vectorielle qui vérifie les relations de commutation

$$\left[\hat{J}_j, \hat{J}_k\right] = i\hbar\epsilon^{jkl}\hat{J}_l \qquad \Longleftrightarrow \qquad \vec{J}\wedge\vec{J} = i\hbar\vec{J} \tag{3.28}$$

avec $\overrightarrow{\hat{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ et on a

$$\left[\overrightarrow{\hat{J}}^2, \hat{J}_x\right] = \left[\overrightarrow{\hat{J}}^2, \hat{J}_y\right] = \left[\overrightarrow{\hat{J}}^2, \hat{J}_z\right] = 0 \tag{3.29}$$

Notons que $\hat{J}_x, \hat{J}_y$ et $\hat{J}_z$ ne commutent pas entre eux, donc on ne peut pas les diagonaliser simultanément. Par contre, on peut diagonaliser simultanément l'un d'entre eux et $\overrightarrow{\hat{J}}^2$, qui sera l'objet de la sousection suivante.

3.3.1 Valeurs propres

Notre objectif est de déterminer les spectres de $\hat{J}_z$ et $\overrightarrow{\hat{J}}^2$. En effet, considérons un état propre $|\psi\rangle$ de $\hat{J}_z$ et $\overrightarrow{\hat{J}}^2$ tels que

$$\hat{J}_z |\psi\rangle = \hbar\lambda |\psi\rangle \tag{3.30}$$

$$\overrightarrow{\hat{J}}^2 |\psi\rangle = \hbar^2\beta |\psi\rangle \tag{3.31}$$

avec les valeurs propres $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Il est convenable d'introduire deux opérateurs $\hat{J}_+$ et $\hat{J}_-$ donnés par

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \tag{3.32}$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \tag{3.33}$$

Ils vérifient les relations de commutation

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_+\right] = \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] + i\left[\hat{J}_z, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_y - i^2\hbar\hat{J}_x = \hbar\hat{J}_+ \tag{3.34}$$

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_-\right] = \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] - i\left[\hat{J}_z, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_y + i^2\hbar\hat{J}_x = -\hbar\hat{J}_- \tag{3.35}$$

$$\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = -i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] + i\left[\hat{J}_y, \hat{J}_x\right] = 2\hbar\hat{J}_z \tag{3.36}$$

Puisque ce sont des combinaisons linéaires de $\hat{J}_x$ et $\hat{J}_y$, donc $\hat{J}_+$ et $\hat{J}_-$ commutent avec l'opérateur $\overrightarrow{\hat{J}}^2$. Considérons l'action de $\hat{J}_z$ sur le ket $\hat{J}_+ |\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{J}_z\hat{J}_+ |\psi\rangle &= \hat{J}_+\hat{J}_z |\psi\rangle + \hbar\hat{J}_+ |\psi\rangle \\ &= \hbar(\lambda+1)\hat{J}_+ |\psi\rangle \end{aligned} \tag{3.37}$$

De même pour le ket $\hat{J}_- |\psi\rangle$ on trouve

$$\begin{aligned} \hat{J}_z\hat{J}_- |\psi\rangle &= \hat{J}_-\hat{J}_z |\psi\rangle - \hbar\hat{J}_- |\psi\rangle \\ &= \hbar(\lambda-1)\hat{J}_- |\psi\rangle \end{aligned} \tag{3.38}$$

On a

$$\overrightarrow{\hat{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad \Longrightarrow \quad \overrightarrow{\hat{J}}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2. \tag{3.39}$$

$\langle\varphi| \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 |\varphi\rangle \geq 0$ car par exemple $\langle\varphi| \hat{J}_x^2 |\varphi\rangle$ est supérieur à la plus petite valeur propre de $\hat{J}_x^2$, qui est un carré et donc positive. On conclut que

$$\langle\psi| \overrightarrow{\hat{J}}^2 - \hat{J}_z^2 |\psi\rangle = \hbar^2(\beta - \lambda^2) \geq 0 \tag{3.40}$$

C'est claire que pour β donné, les valeurs propres possibles de $\hat{L}_z$ sont bornées :

$$-\sqrt{\beta} \leq j' \leq \lambda \leq j \leq \sqrt{\beta} \tag{3.41}$$

où $j \geq 0$ est la plus grande valeur propre positive et j' la plus petite valeur propre négative de l'opérateur $\hat{J}_z$. Considérons l'état $|\psi_j\rangle$ tel que

$$\hat{\vec{J}}^2 |\psi_j\rangle = \hbar^2 \beta |\psi_j\rangle \tag{3.42}$$

$$\hat{J}_z |\psi_j\rangle = \hbar j |\psi_j\rangle \tag{3.43}$$

Puisque j est la plus grande valeur propre positive de $\hat{J}_z$ et $\hat{J}_+ |\psi_j\rangle$ est un vecteur propre de $\hat{J}_z$ de valeur propre $\hbar(j+1)$, alors il faut que

$$\hat{J}_+ |\psi_j\rangle = 0 \quad \Longrightarrow \quad \left\| \hat{J}_+ |\psi_j\rangle \right\|^2 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \langle\psi_j| \hat{J}_- \hat{J}_+ |\psi_j\rangle = 0 \tag{3.44}$$

Or on peut remplacer

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \tag{3.45}$$

pour avoir le résultat suivant

$$\langle\psi_j| \hat{J}_- \hat{J}_+ |\psi_j\rangle = \hbar^2(\beta - j^2 - j) = 0 \tag{3.46}$$

ce qui implique

$$\boxed{\beta = j(j+1)} \tag{3.47}$$

De même, considérons le ket $|\psi_{j'}\rangle$ avec

$$\hat{\vec{J}}^2 |\psi_{j'}\rangle = \hbar^2 \beta |\psi_{j'}\rangle \tag{3.48}$$

$$\hat{J}_z |\psi_{j'}\rangle = \hbar j' |\psi_{j'}\rangle \tag{3.49}$$

Puisque j' est la plus petite valeur propre négative de $\hat{J}_z$, on doit avoir

$$\hat{J}_- |\psi_{j'}\rangle = 0 \quad \Longrightarrow \quad \left\| \hat{J}_- |\psi_{j'}\rangle \right\|^2 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \langle\psi_{j'}| \hat{J}_+ \hat{J}_- |\psi_{j'}\rangle = 0 \tag{3.50}$$

Notons que

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z \tag{3.51}$$

ce qui donne

$$\langle\psi_{j'}| \hat{J}_+ \hat{J}_- |\psi_{j'}\rangle = \hbar^2(\beta - j'^2 + j') = 0 \tag{3.52}$$

et par conséquent on obtient

$$\boxed{\beta = j'(j'-1)} \tag{3.53}$$

D'aprés Eqs. (3.47) et (3.53), on doit avoir

$$j'(j'-1) = j(j+1) \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} j' = j \\ \text{ou} \\ j' = j+1 \end{cases} \tag{3.54}$$

La deuxième solution à rejeter car $j' \leq j$. En resumé les vecteurs propres communs à $\overrightarrow{\hat{J}}^2$ et $\hat{J}_z$ corespondant à une valeur propre $\hbar^2 j(j+1)$ de $\overrightarrow{\hat{J}}^2$ ont des valeurs propres de $\hat{J}_z$ de la forme $\hbar\lambda$ avec $-j \leq \lambda \leq j$.

Maintenant considérons l'état $|\psi\rangle$ avec

$$\overrightarrow{\hat{J}}^2 |\psi\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\psi\rangle \tag{3.55}$$

$$\hat{J}_z |\psi\rangle = \hbar j |\psi\rangle \tag{3.56}$$

Appliquons n-fois l'opérateur $\hat{J}_-$ de façon répétée sur cet état pour avoir les vecteurs propres de $\overrightarrow{\hat{J}}^2$ et $\hat{J}_z$ correspondants, respectivement, aux valeurs propres

$$\hbar^2 j(j+1) \tag{3.57}$$

$$\hbar(j-1), \cdots, \hbar(j-n) \tag{3.58}$$

Rappellons que $-j$ est la plus petite valeur propre possible de $\hat{J}_z$ et donc pour ne pas avoir de vecteurs propres de valeurs propres inférieures à $-j$, il faut que cette série contienne un vecteur propre de valeur propre $-j$. Donc il existe un entier n tel que

$$j - n = -j \qquad \Longrightarrow \qquad j = \frac{n}{2} \tag{3.59}$$

ce qui implique que j est entier ou demi-entier, i.e. $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$. Finallement, les valeurs propres possibles de $\overrightarrow{\hat{J}}^2$ et de $\hat{J}_z$ pour une base commune de des vecteurs propres sont

$$\hbar^2 j(j+1), \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \cdots \tag{3.60}$$

$$\hbar m, \qquad m = -j, -j+1, \cdots, j \tag{3.61}$$

3.3.2 Etats propres

On note par $|j, m\rangle$ le vecteur propre commun à $\overrightarrow{\hat{J}}^2$ et $\hat{J}_z$ correspondant aux valeurs propres $\hbar^2 j(j+1)$ et $\hbar m$. Supposons $|j, m\rangle$ est un état normalisé, d'aprés (3.51) on a

$$\left\| \hat{J}_- |j, m\rangle \right\|^2 = \langle j, m| \hat{J}_+ \hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar^2 (j(j+1) - m(m-1)) \tag{3.62}$$

ce qui conduit a choisir l'action suivante de l'opérateur $\hat{J}_-$

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, |j, m-1\rangle \tag{3.63}$$

On fait la même chose pour $\hat{J}_+$

$$\left\| \hat{J}_+ |j, m\rangle \right\|^2 = \langle j, m| \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1)) \tag{3.64}$$

et par suite prendre l'action suivante :

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, |j, m+1\rangle \tag{3.65}$$

On peut par action des opérateurs $\hat{J}_+$ et $\hat{J}_-$ construire tous les $2j+1$ états propres de $\hat{\vec{J}}^2$ et $\hat{J}_z$. En effet, Partant de l'état $|j,j\rangle$ et en appliquant n-fois l'opérateur $\hat{J}_-$:

$$\begin{aligned}
\hat{J}_- |j,j\rangle &= C_(j,j)\,|j,j\rangle\,|j,j-1\rangle && (3.66)\\
\hat{J}_-^2 |j,j\rangle &= C_(j,j)C_(j,j-1)\,|j,j-2\rangle && (3.67)\\
\hat{J}_-^3 |j,j\rangle &= C_(j,j)C_(j,j-1)C_(j,j-2)\,|j,j-3\rangle && (3.68)\\
\vdots \quad & \vdots\\
\hat{J}_-^n |j,j\rangle &= C_(j,j)C_(j,j)C_(j,j-1)C_(j,j-2)\cdots C_(j,j-n)\,|j,j-n\rangle && (3.69)
\end{aligned}$$

On utilise Eq. (3.63) pour regrouper tous les coefficients :

$$\hat{J}_-^n |j,j\rangle = \hbar^n \sqrt{\frac{n!(2j)!}{(2j-n)!}}\,|j,j-n\rangle \tag{3.70}$$

Maintenant posons $j-n=m$ pour avoir

$$\boxed{|j,m\rangle = \frac{1}{\hbar^{j-m}}\sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}}\hat{J}_-^{j-m}\,|j,j\rangle} \tag{3.71}$$

On peut construire même base par application de $\hat{J}_+^{j+m}$ sur létat $|j,-j\rangle$:

$$\boxed{|j,m\rangle = \frac{1}{\hbar^{j+m}}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}}\hat{J}_+^{j+m}\,|j,-j\rangle} \tag{3.72}$$

3.3.3 Représentation matricielle

On va etablir les matrices representatives description operateurs $\hat{\vec{J}}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{J}_\pm$, $\hat{J}_x$ et $\hat{J}_y$. En effet, les élements de chaque opérateurs sont

$$\begin{aligned}
&(J^2) \longrightarrow \langle j',m'|\,\hat{\vec{J}}^2\,|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)\delta_{j'j}\delta_{m'm} && (3.73)\\
&(J_z) \longrightarrow \langle j',m'|\,\hat{J}_z\,|j,m\rangle = \hbar m\delta_{j'j}\delta_{m'm} && (3.74)\\
&(J_\pm) \longrightarrow \langle j',m'|\,\hat{J}_\pm\,|j,m\rangle = C_\pm(j,m)\delta_{j'j}\delta_{m'm\pm1} && (3.75)\\
&(J_x) = \frac{1}{2}\left(\hat{J}_+ - \hat{J}_-\right) && (3.76)\\
&(J_y) = \frac{1}{2}\left(\hat{J}_+ - \hat{J}_-\right) && (3.77)
\end{aligned}$$

Pour $j'=j$ on trouve

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\vec{J}}^2 \rangle &= \hbar^2 j(j+1) && (3.78)\\
\langle \hat{J}_z \rangle &= \hbar m && (3.79)\\
\langle \hat{J}_x \rangle &= \langle \hat{J}_y \rangle = 0 && (3.80)
\end{aligned}$$

Application :

- Pour $j = \frac{1}{2} \Longrightarrow m = \pm\frac{1}{2}$, donc on obtient

$$\left(J^2\right) = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.81}$$

$$(J_z) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.82}$$

$$(J_+) = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & \end{pmatrix} \tag{3.83}$$

$$(J_-) = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.84}$$

- Pour $j = 1 \Longrightarrow m = 1, 0, -1$, donc on obtient

$$\left(J^2\right) = 2\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.85}$$

$$(J_z) = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.86}$$

$$(J_+) = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.87}$$

$$(J_-) = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.88}$$

$$(J_x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.89}$$

$$(J_y) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{3.90}$$

3.4 Moment Cinétique Orbital

Pour traiter le cas particulier du moment cinétique orbital, il est commode de passer en coordonnées sphériques :

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \tag{3.91}$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi \tag{3.92}$$

$$z = r\cos\theta \tag{3.93}$$

ou bien

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \tag{3.94}$$

$$\tan^2\theta = \frac{x^2 + y^2}{z^2} \tag{3.95}$$

$$\tan\varphi = \frac{y}{x}. \tag{3.96}$$

En utilisant la formule des dérivées composées :

$$\frac{\partial f(r,\theta,\varphi)}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_i} + \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x_i} + \frac{\partial f}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \tag{3.97}$$

pour avoir

1. $\frac{\partial r^2}{\partial x_i} = 2r\frac{\partial r}{\partial x_i}$

$$2r\frac{\partial r}{\partial x} = 2x \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi \tag{3.98}$$

$$2r\frac{\partial r}{\partial y} = 2y \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\sin\varphi \tag{3.99}$$

$$2r\frac{\partial r}{\partial z} = 2r \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta \tag{3.100}$$

2. $\frac{\partial \tan^2\theta}{\partial x_i} = 2\tan\theta\frac{1}{\cos^2\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x_i}$

$$2\tan\theta\frac{1}{\cos^2\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{2x}{z^2} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r} \tag{3.101}$$

$$2\tan\theta\frac{1}{\cos^2\theta}\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{2y}{z^2} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r} \tag{3.102}$$

$$2\tan\theta\frac{1}{\cos^2\theta}\frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{2(x^2+y^2)}{z^2} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r} \tag{3.103}$$

3. $\frac{\partial \tan\varphi}{\partial x_i} = \frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}$

$$\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \tag{3.104}$$

$$\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{x} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y} = -\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \tag{3.105}$$

$$\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0 \tag{3.106}$$

Ce qui nous permet d'écrire l'opérateur $\hat{\vec{p}}$ en coordonnées sphériques :

$$\hat{p_x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.107}$$

$$\hat{p_y} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\hbar}{i}\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.108}$$

$$\hat{p_z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{3.109}$$

ainsi que l'opérateur $\hat{\vec{L}}$:

$$\begin{aligned}
\hat{L_x} &= \hat{y}\hat{p_z} - \hat{z}\hat{p_y} \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(r\sin\theta\sin\varphi\cos\theta - r\cos\theta\sin\theta\sin\varphi\right)\frac{\partial}{\partial r} \\
&\quad + \frac{\hbar}{i}\left(-\frac{r\sin\theta\sin\varphi\sin\theta}{r} - \frac{r\cos\theta\cos\theta\sin\varphi}{r}\right)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hbar}{i}\left(-r\cos\theta\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&\Longrightarrow \boxed{\hat{L_x} = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]}
\end{aligned} \tag{3.110}$$

$$\begin{aligned}
\hat{L_y} &= \hat{z}\hat{p_x} - \hat{x}\hat{p_z} \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(r\cos\theta\sin\theta\cos\varphi - r\sin\theta\cos\varphi\cos\theta\right)\frac{\partial}{\partial r} \\
&\quad +\frac{\hbar}{i}\left(\frac{r\cos\theta\cos\theta\cos\varphi}{r} + \frac{r\sin\theta\cos\varphi\sin\theta}{r}\right)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hbar}{i}\left(-r\cos\theta\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&\Longrightarrow \boxed{\hat{L_y} = \frac{\hbar}{i}\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]}
\end{aligned} \tag{3.111}$$

$$\begin{aligned}
\hat{L_z} &= \hat{x}\hat{p_y} - \hat{y}\hat{p_x} \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(r\sin\theta\cos\theta\sin\theta\sin\varphi - r\sin\theta\sin\varphi\sin\theta\cos\varphi\right)\frac{\partial}{\partial r} \\
&\quad +\frac{\hbar}{i}\left(\sin\theta\cos\varphi\cos\varphi\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r} - r\sin\theta\sin\varphi\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\right)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&\quad +\frac{\hbar}{i}\left(r\sin\theta\cos\varphi\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&\Longrightarrow \boxed{\hat{L_z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}
\end{aligned} \tag{3.112}$$

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+ &= \hat{L}_x + i\hat{L}_y \\
&= \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
\end{aligned} \tag{3.113}$$

$$\begin{aligned}
\hat{L}_- &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\
&= \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
\end{aligned} \tag{3.114}$$

On a

$$\vec{\hat{L}}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z \tag{3.115}$$

avec

$$\begin{aligned}
\hat{L}_-\hat{L}_+ &= \hbar^2 e^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
&= \hbar^2 e^{-i\varphi}\left[-e^{i\varphi}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right. \\
&\quad \left. +i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{i\varphi}\left(i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] \\
&= \hbar^2 e^{-i\varphi}\left[-e^{i\varphi}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - e^{i\varphi}\frac{-i}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - e^{i\varphi}i\cot\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi\partial\theta}\right. \\
&\quad \left. +i\cot\theta ie^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta e^{i\varphi}\frac{\partial^2}{\partial\varphi\partial\theta} + i\cot\theta ie^{i\varphi}i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + i\cot\theta e^{i\varphi}i\cot\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \\
&= \hbar^2\left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{i}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot^2\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \\
&= \hbar^2\left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]
\end{aligned}$$

Ce qui donne

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}^2 &= \hbar^2\left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+i\frac{\partial}{\partial\varphi}-\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\\ &\Longrightarrow \boxed{\hat{\vec{L}}^2=-\hbar^2\left(-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}\end{aligned} \tag{3.116}$$

Considérons une fonction propre de $\hat{L_z}$:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)=\hbar m\psi(r,\theta,\varphi) \qquad \Longrightarrow \qquad \psi(r,\theta,\varphi)=\chi(r,\theta)e^{im\varphi} \tag{3.117}$$

Mais pour que $\psi(r,\theta,\varphi)$ soit une fonction univoque des coordonnées, il faut que

$$\psi(r,\theta,\phi+2\pi)=\psi(r,\theta,\varphi) \qquad \Longrightarrow \qquad e^{i2\pi m}=1, \qquad m \text{ entier} \tag{3.118}$$

Les valeurs propres de moment cénitique orbitale sont données donc par la forme suivante :

$$\begin{array}{lcl}\text{Valeurs propres de } \hat{\vec{L}}^2 & : & \hbar^2 l(l+1), \quad l \text{ entier}\\ \text{Valeurs propres de } \hat{L_z} & : & \hbar m, \qquad m=-l,\cdots,l\end{array} \tag{3.119}$$

3.5 Harmoniques Sphériques

Pour déterminer les fonctions propres communes à $\hat{\vec{L}}^2$ et $\hat{L_z}$ de valeurs propres $\hbar^2 l(l+1)$ et $\hbar m$, on itroduit la séperation des variables :

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=F_l^m(\theta)e^{im\varphi} \tag{3.120}$$

où la fonctoin $Y_l^l(\theta,\varphi)$ vérifie la condition :

$$\hat{L_+}Y_l^l=0 \tag{3.121}$$

ce qui donne

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-l\cot\theta\right)F_l^l(\theta)=0 \tag{3.122}$$

Cette équation différentielle a pour solution

$$f(\theta)=(\sin\theta)^l. \tag{3.123}$$

En effet,

$$\frac{\partial f}{\partial\theta}=l\cos\theta(\sin\theta)^{l-1}=\frac{l\cos\theta}{\sin\theta}f \tag{3.124}$$

Donc on trouve

$$Y_l^l(\theta,\varphi)=c_l(\sin\theta)^l e^{il\varphi} \tag{3.125}$$

On calcule la constante de normalisation c_l de cette fonction à travers la norme

$$|c_l|^2\int_0^\pi(\sin\theta)^{2l}d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi=1 \tag{3.126}$$

ce qui donne

$$|c_l|^2\times 2\pi\times I_l=1 \tag{3.127}$$

avec

$$I_l = \int_0^\pi \sin\theta d\theta (\sin\theta)^{2l} \tag{3.128}$$

Pour calculer cette intégrale, on prossède par le changement de varialbe

$$u = \cos\theta, \qquad du = -\sin\theta d\theta, \qquad (\sin\theta)^2 = 1 - u^2 \tag{3.129}$$

pour avoir

$$I_l = \int_{-1}^{1} du (1-u^2)^l \tag{3.130}$$

I_l se calcule par récurrence :

$$\begin{aligned}
I_0 &= 2 && (3.131)\\
I_l &= \int_{-1}^{1} du(1-u^2)^{l-1}(1-u^2) && (3.132)\\
&= I_{l-1} - \int_{-1}^{1} du \times (1-u^2)^{l-1} && (3.133)\\
&= I_{l-1} - \left[- \left[u \frac{(1-u^2)^l}{2l} \right]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} du \frac{(1-u^2)^l}{-2l} \right] && (3.134)\\
&= I_{l-1} \frac{1}{2I} I_l && (3.135)\\
\Longrightarrow \ & I_l \left(1 + \frac{1}{2l} \right) = I_{l-1} && (3.136)\\
\Longrightarrow \ & I_l = \frac{2l}{2l+1} I_{l-1} = \frac{(2l)(2l-2)\cdots 2}{(2l+1)(2l-1)\cdots 3} \times I_0 && (3.137)
\end{aligned}$$

ou bien

$$I_l = \frac{[(2l)(2l-2)\cdots 2]^2}{(2l+1)!} \times I_0 \tag{3.138}$$

Autrement dit, on a

$$I_l = \frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!} \tag{3.139}$$

Finalement on doit avoir

$$|c_l|^2 = \frac{(2l+1)!}{4\pi} \frac{1}{2^{2l}(l!)^2} \tag{3.140}$$

Le choix conventionnel consite à prendre

$$\boxed{c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}} \tag{3.141}$$

Les autres fonctions s'en déduisent par application systématique de $\hat{L}_-$, sachant que

$$Y_l^{m-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \hat{L_-} Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{3.142}$$

avec $\hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi} \left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right]$.

Exemples :

1. $\boxed{l=0}$

$$Y_0^0(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{3.143}$$

2. $\boxed{l=1}$

$$Y_1^1(\theta,\varphi)=-\tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{6}{4\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}$$
$$\Longrightarrow \boxed{Y_1^1(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}}$$
$$Y_1^0(\theta,\varphi)=\tfrac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\left(-\sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}\right)[-\cos\theta e^(i\varphi)+i\tfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\theta i e^{i\varphi}]=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}2\cos\theta \tag{3.144}$$
$$\boxed{Y_1^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta}$$
$$\Longrightarrow \boxed{Y_1^{-1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}}$$

3. $\boxed{l=2}$

$$\boxed{Y_2^{\pm2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{35\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\varphi}}$$
$$\boxed{Y_2^{\pm2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}} \tag{3.145}$$
$$\boxed{Y_2^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)}$$

Remarques:

- Les harmoniques sphériques sont des fonctions propres d'opérateurs hérmitiques. Elles sont donc orthogonales :

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta(Y_l^m)^\dagger Y_{l'}^{m'}=\delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \tag{3.146}$$

- La dépendance en θ des harmoniques sphériques est reliée à des fonctions particuliéres appelées polynômes et fonctions de Legendre.

- On peut établir l'expression générale suivante :

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+l(l+m)!}{4\pi(l-m)!}}e^{im\varphi}(\sin\theta)^{-m}\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{2l}} \tag{3.147}$$

- En particulier, on a

$$Y_l^{-m}(\theta,\varphi)=(-1)^m(Y_l^m(\theta,\varphi))^* \tag{3.148}$$

Chapitre 4

Mouvement Dans Un Potentiel Coulombien

4.1 Spectre d'Energie

Pour une valeur donnée de l, on peut chercher les états stationnaires de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un potentiel central sous la forme :

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{4.1}$$

où $R(r)$ est solution de l'équation qui s'obtient en remplaçant $\hat{\vec{L}}^2$ par $\hbar^2 l(l+1)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right]R(r) = ER(r) \tag{4.2}$$

Il est convenable de changer la fonction $R(r)$ par

$$R(r) = \frac{1}{r}u(r) \tag{4.3}$$

et donc les derivées deviennent

$$\frac{dR}{dr} = -\frac{1}{r^2}u(r) + \frac{1}{r}\frac{du}{dr}, \qquad \frac{d^2R}{dr^2} = \frac{2}{r^3}u(r) - \frac{2}{r^2}\frac{du}{dr} + \frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2} \tag{4.4}$$

On remplace dans (4.2) pour avoir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{2}{r^3}u(r) - \frac{2}{r^2}\frac{du}{dr} + \frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2}{r^3}u(r) + \frac{2}{r^2}\frac{du}{dr}\right] + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right]\frac{u(r)}{r} = E\frac{u(r)}{r} \tag{4.5}$$

qui peut se simplier

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r)} \tag{4.6}$$

Dans le cas particulier du potentiel Coulombien d'interaction entre un noyau de charge $+Z_e$ et un électron de charge $-e$, on peut fixer le potentiel $V(r)$

$$V(r) = -\frac{Z_e^2}{r} \tag{4.7}$$

Dans la suite on pose $\alpha = +Z_e^2$. Maintenant, pour r petit sachant que $l \neq 0$ on peut négliger $-\frac{\alpha}{r}$ devant $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ et donc écrire Eq. (4.6) comme

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) \simeq \frac{l(l+1)}{r^2}u(r) \tag{4.8}$$

Supposons que $u(r)$ est de la forme r^s, donc on remplace dans Eq. (4.8) pour avoir

$$s(s-1)r^{s-2} = l(l+1)r^{s-2} \tag{4.9}$$

ce qui implique

$$s(s-1) = l(l+1) \qquad \Longrightarrow \qquad s = l+1 \quad \text{ou} \quad s = -l \tag{4.10}$$

Puisque la condition de normalisation sur $R(r)$ impose que $\int_0^\infty r^2 R^2(r)dr$ soit convergente, c'est-à-dire que $\int_0^\infty u^2(r)dr$ soit convergente, alors $s = l+1$. Pour $l = 0$, on obtient prés de l'origine ($r \simeq 0$) :

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) = -\frac{u(r)}{r} \tag{4.11}$$

Supposons $u(r)$ est un polynome :

$$u(r) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \cdots \tag{4.12}$$

ce qui donne

$$\frac{d^2}{dr^2}u(r) = 2a_2 + \cdots \tag{4.13}$$

et par suite impose la condition $a_0 = 0$ pour avoir donc $\frac{u(r)}{r}$. En résumé pour r petit, la solution est de l'équation différentiel est de la forme

$$\boxed{u(r) \propto r^{l+1}} \tag{4.14}$$

Maintenant si on revient à Eq. (4.6), on peut définir un potentiel effectif comme

$$U(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} \tag{4.15}$$

qui peut se representer graphiquement comme dans Figure 4.1

On veut chercher des solutions de Eq. (4.6) dans le cas ou l'énergie est negative ($E < 0$). On commence par faire le changement de variable et paramètres

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \qquad \lambda = \sqrt{-\frac{E}{E_1}}, \qquad E_1 = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{m\alpha} \tag{4.16}$$

On remplace dans Eq. (4.6) pour avoir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma_0^2\rho^2} - \frac{\alpha}{a_0\rho}\right]u(\rho) = -E_1\lambda^2 u(\rho) \tag{4.17}$$

$$\Longrightarrow \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma_0^2\rho^2}\left(\frac{-2ma_0^2}{\hbar^2}\right) + \frac{2ma_0^2\alpha}{\hbar^2 a_0\rho}\right]u(\rho) = \frac{2mE_1 a_0^2}{\hbar^2}\lambda^2 u(\rho) \tag{4.18}$$

$$\Longrightarrow \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right]u(\rho) = \frac{2m^2\alpha^2}{2\hbar^4}\frac{\hbar^4}{m^2\alpha^2}\lambda^2 u(\rho) \tag{4.19}$$

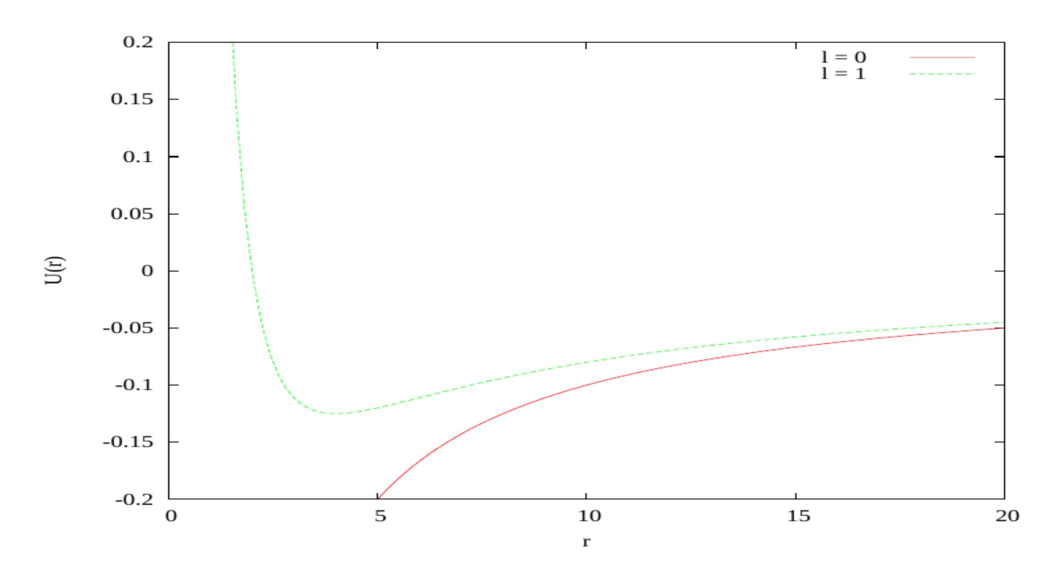


Fig 4.1: Variation du potentiel effectif.

Après simplification on trouve

$$\boxed{\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2\right] u(\rho) = 0} \tag{4.20}$$

Qunad $\rho \to +\infty$, on a approximativement

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} \simeq \lambda^2 u \qquad \Longrightarrow \qquad u(\rho) \simeq e^{\pm\lambda\rho} \tag{4.21}$$

Grâce à la condition de normalisation on rejete la solution $e^{\lambda\rho}$. Maintenant, on cherche la solution sous la forme $u(\rho) = e^{-\lambda\rho} y(\rho)$, donc on calcule les dérivées :

$$\frac{du}{d\rho} = -\lambda e^{-\lambda\rho} + e^{-\lambda\rho} y' \tag{4.22}$$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \lambda^2 e^{-\lambda\rho} y - 2\lambda e^{-\lambda\rho} y' + e^{-\lambda\rho} y'' \tag{4.23}$$

ce qui donne

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda\frac{d}{d\rho} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] y(\rho) = 0 \tag{4.24}$$

Pour aller plus loin, on cherche une solution sous la forme d'un développement, à savoir

$$y(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{q=0}^{+\infty} c_q \rho^q = \sum_{q=0}^{+\infty} c_q \rho^{q+l+1} \tag{4.25}$$

où le préfacteur vient de la condition $u(r) \propto r^{l+1}$ pour r petit. Calculons

$$\frac{dy}{d\rho} = \sum_{q=0}^{+\infty} c_q (q+l+1)\rho^{l+q} \tag{4.26}$$

$$\frac{d^2 y}{d\rho^2} = \sum_{q=0}^{+\infty} c_q (q+l+1)(q+l)\rho^{l+q-1} \tag{4.27}$$

et remplaçons ds Eq. (4.24) pour avoir

$$\sum_{q=0}^{+\infty}\left[c_q(q+l+1)(q+l)\rho^{l+q-1}-2\lambda c_q(q+l+1)(q+l)\rho^{l+q}+2c_q\rho^{l+q}-c_q l(l+1)^{l+q-1}\right]=0 \tag{4.28}$$

Cette equation peut decomposer en deux parties :

$$c_0(l+1)l\rho^{l-1}-c_0(l+1)l\rho^{l-1}=0 \tag{4.29}$$

$$c_q(q+l+1)(q+1)-l(q+1)-2\lambda c_{q-1}(q+l)+2c_{q-1}-c_q l(l+1)=0 \tag{4.30}$$

ou dans la dernière équation, on fait le changement de q à $q-1$, qui peut s'écrire comme

$$c_q q(q+2l+1)=2c_{q-1}(\lambda(q+1)-1) \tag{4.31}$$

ou bien

$$\boxed{c_q=c_{q-1}\frac{2(\lambda(q+1)-1)}{q(q+2l+1)}} \tag{4.32}$$

ANoton que lorsque $q\longrightarrow+\infty$, on trouve

$$c_q\propto c_{q-1}\frac{2\lambda}{q}\qquad\Longrightarrow\qquad c_q\propto\frac{1}{q!}2\lambda \tag{4.33}$$

et par suite la solution devient

$$y(\rho)\propto\rho^{l+1}e^{2\lambda\rho}\qquad\Longrightarrow\qquad u(\rho)\propto e^{\lambda\rho} \tag{4.34}$$

on c'est tombé sur la solution rejetée précédemment. Il faut donc que le numérateur ds Eq. (4.32) s'annule, c'est à dire certain order $k\geq 1$ on doit avoir

$$\lambda(k+1)-1=0\qquad\Longrightarrow\qquad\lambda=\tfrac{1}{k+1} \tag{4.35}$$

à égaliser avec $\lambda=\sqrt{-\frac{E}{E_1}}$ pour trouver finalement les énergies possibles

$$\boxed{E_{k,l}=-\frac{E_1}{(k+l)^2}},\qquad k=1,2,\cdots \tag{4.36}$$

On peut maintenant utiliser la relation de récurrence sur les c_q pour déterminer les solutions correspondantes $y_{k,l}(\rho)$.

Exemples :

1. $\boxed{k=1,l=0}$

$$\lambda=1,\qquad c_1=0\qquad\Longrightarrow\qquad u_{1,0}(\rho)=c_0\rho e^{\rho} \tag{4.37}$$

2. $\boxed{k=1,l=1}$

$$\lambda=\tfrac{1}{2},\qquad c_1=0\qquad\Longrightarrow\qquad u_{1,1}(\rho)=c_0\rho^2e^{\frac{-\rho}{2}} \tag{4.38}$$

3. $\boxed{k=2,l=0}$

$$\lambda=\tfrac{1}{2},\qquad c_1=c_0\tfrac{2(\frac{1}{2}\times1\times-1)}{1(1+1)}=-\tfrac{1}{2}c_0\qquad\Longrightarrow\qquad u_{2,0}(\rho)=c_0\rho(1-\tfrac{\rho}{2})e^{-\frac{\rho}{2}} \tag{4.39}$$

En fin pour avoir les fonctions radiales normalisées $R(r)$:

$$\int_0^{+\infty} R^2 r^2 dr = 1 \tag{4.40}$$

on remplace ρ par $\frac{r}{a_0}$ et on divise par r.

Exemples :

1. $$R_{1,0}(r) = c_0 e^{-\frac{r}{a_0}} \tag{4.41}$$

   La constante c_0 est donnée par

   $$\int_0^{+\infty} c_0^2 e^{\frac{-2r}{a_0}} r^2 dr = 1 \tag{4.42}$$

   On sait que

   $$\int_0^{+\infty} x^2 e^{-ax} dx = \frac{d^2}{da^2}\left[\int_0^{+\infty} e^{-ax} dx\right] = \frac{d^2}{da^2}\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{2}{a^3} \tag{4.43}$$

   ce qui donne

   $$\int_0^{+\infty} c_0^2 e^{\frac{-2r}{a_0}} r^2 dr = 2 \times \left(\frac{a_0}{3}\right)^3 = \frac{a_0^3}{4} \qquad \Longrightarrow \qquad c_0 = 2a_0^{\frac{-3}{2}} \tag{4.44}$$

   et par suite la fonction radiale :

   $$\boxed{R_{1,0}(r) = 2a_0^{\frac{-3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}} \tag{4.45}$$

2. Si on utilise la formule

   $$\int_0^{+\infty} r^n e^{-ar} dr = n! a^{-1-n} \tag{4.46}$$

   on peut trouver

   $$\boxed{R_{1,1}(r) = (2a_0)^{\frac{-3}{2}} \frac{r}{\sqrt{3}} a_0 e^{\frac{-r}{2a_0}}} \tag{4.47}$$

   $$\boxed{R_{2,0}(r) = 2(2a_0)^{\frac{-3}{2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{\frac{-r}{2a_0}}} \tag{4.48}$$

4.2 Application : Atome d'Hydrogéne

On s'interesse à appliquer les résults en haut pour l'éctude du spectre d'énrgie de l'atome d'dydrogène. On peut calculer les constantes :

$$E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6[eV], \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,52[\mathring{A}] \tag{4.49}$$

On represente les niveaux d'énergie en fonction de l comme l'indique Figure 4.2.

D'aprés Eq. (4.36), l'énergie ne dépend que de $k + l$. Vu l'importance de l'énergie pour les propriétés physique, il est habituel de remplacer le nombre quantique k par $n = k + 1$ et de repérer les fonctions d'ondes par les nombres qantiques n, l, m, avec n est dit le nombre quantique principal. Bien que l'énergie ne dépende que de n, et que la classification par n, l, m soit complète, il persiste des dégénérescences. En effet, une valeur de n peut en général être

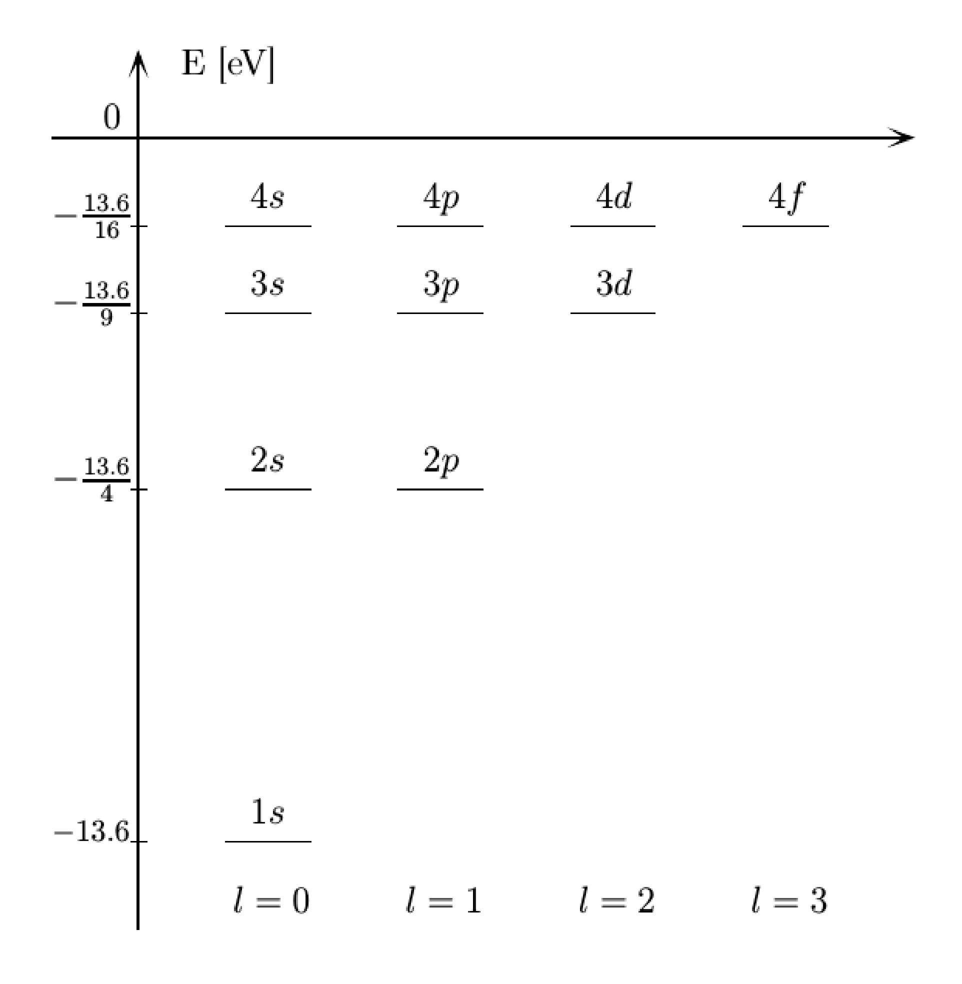


Fig 4.2: Représentation du spectre de l'atome d'hydrogène.

obtenue pour plusieurs valeurs de l, plus précisément toute les valeurs de l inférieures ou égales à $n-1$. De plus, pour une valeur de l, il y a $2l+1$ valeurs de m possibles. Au total, la dégénérescence vaut

$$\begin{aligned} &1+3+\cdots+(2n-1) = (2-1)+(4-1)+\cdots+(2n-1) \\ &2(1+2+\cdots+n)-n \\ &2\frac{n(n+1)}{2}-n = n^2 \end{aligned} \tag{4.50}$$

La dégénérescence du niveau n est n^2.

Remarques :

- La dégénérescence des niveaux électroniques de l'atome d'hydrogéne est en fait $2n^2$ du fait du spin (voir plus loin).
- Il y a également des solutions décrivant la diffusion d'électrons par les protons.

Chapitre 5

Moment Cénitique de Spin

5.1 Introduction

L'état quantique d'une particule est décrite par sa fonction d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ ou bien le ket $|\psi\rangle$, qui est un vecteur de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ de dimension infinie. Pour certaines particules (électrons, neutrons, protons, $\cdots$) l'expérience montre qu'elles possédent un moment cinétique intrinséque, appelé spin et noté $\vec{S}$, et qu'il a seulement deux états distincts. La direction du spin est celle de l'axe de rotation.

Dans l'expérience de *Stern-Gerlach* (Figure 5.1) un faisceau de particules neutres (comme le neutron) traverse un champ magnétique non-homogène. Ce dernier intéragit avec le moment cinétique $\vec{S}$ de chaque particule et par conséquent la trajectoire de chaque particule est défléchie selon la valeur de son moment cinétique intrinséque $\vec{S}$. Cette expérience montre qu'il y a deux trajectoires distrinctes à la sortie du dispositif correspondantes à deux états orientés parallélement (ou anti-parallélement) à l'axe z, que l'on notera, respectivement, $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$.

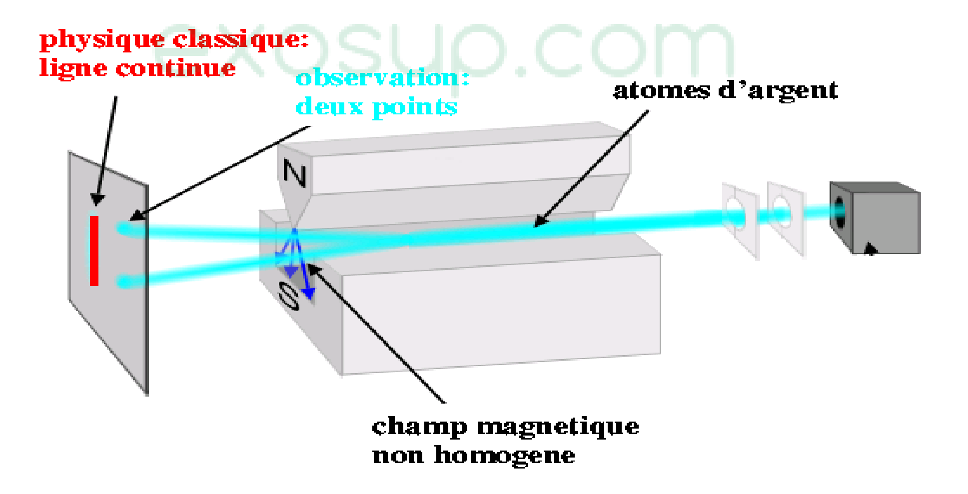


Fig 5.1: Expérience de Stern-Gernlach.

L'expérience a montrée que que l'état de spin $|s\rangle$ de la particule est décrit par un vecteur propre dans un espace noté $\mathcal{H}_{spin}$ de dimension deux, engendré par les deux états orthogonaux $|+\rangle_z, |-\rangle_z$. Ces deux états correspondent à des spins en haut et en bas parallèles à l'axe z. Donc un état de spin général de $\mathcal{H}_{spin}$ s'écrit comme combinaison :

$$|s\rangle = a\,|+\rangle_z + b\,|-\rangle_z\,, \qquad a, b \in \mathbb{C} \tag{5.1}$$

Dans la suite on va oublier l'indice z et noter $|+\rangle_z \equiv |+\rangle$ et $|-\rangle_z \equiv |-\rangle$. On peut mesurer cet état pour les deux faisceaux en haut et en bas avec des probabilités suivantes :

$$P_+ = \frac{|\langle +|s\rangle|^2}{\langle s|s\rangle} = \frac{|a|^2}{|a|^2+|b|^2} \tag{5.2}$$

$$P_- = \frac{|\langle -|s\rangle|^2}{\langle s|s\rangle} = \frac{|b|^2}{|a|^2+|b|^2} \tag{5.3}$$

Il est claire que après la détection dans le faisceau du haut, par exemple, l'état de spin sera $|s\rangle = |+\rangle$.

5.2 Opérateur de Spin $\hat{S}^2$

5.2.1 Cas général

Dans ce cas l'opérateur $\hat{S} \equiv \hat{J}$ et par suite toutes les propriétés de $\hat{J}$ sont vérifiées par l'opérateur $\hat{S}$ à savoir

$$\vec{S} \wedge \vec{S} = i\hbar\vec{S} \tag{5.4}$$

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar s(s+1) |s, m_s\rangle \tag{5.5}$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \tag{5.6}$$

$$\hat{S}_\pm |s, m_s\rangle = C_\pm(s, m_s) |s, m_s \pm 1\rangle \tag{5.7}$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right) \tag{5.8}$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i}\left(\hat{S}_+ - \hat{S}_-\right) \tag{5.9}$$

avec $-s \le m_s \le s$ et s est un demi-entier. Notons que l'état $|s, m_s\rangle$ est l'analogue de $|j, m\rangle$ base commune de $\hat{\vec{J}}^2$ et $\hat{J}_z$.

5.2.2 Particule de spin $\frac{1}{2}$

Pour une particule de spin $\frac{1}{2}$, la dimension de l'espace $\mathcal{H}_{spin}$ est $= 2s+1 = 2$. Donc il possède deux états formant sa base :

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \qquad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \tag{5.10}$$

qui peuvent se noter également comme

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |+\rangle = |\uparrow\rangle = \left|+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{5.11}$$

$$\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = |-\rangle = |\downarrow\rangle = \left|-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{5.12}$$

Cette base verifie la relation d'orthonormalisation :

$$\langle s, m_s' | s, m_s\rangle = \delta_m s m s' \qquad \Longleftrightarrow \qquad \begin{cases} \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \\ \langle +|-\rangle = \langle +|-\rangle = 0 \end{cases} \tag{5.13}$$

ainsi que la relation de fermeture :

$$\sum_{ms} |s, m_s\rangle \langle s, m_s| = \mathbb{I} \qquad \Longleftrightarrow \qquad |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{I} \tag{5.14}$$

Les actions des opérateurs sur cette base sont

$$\hat{S}^2 \left|\pm\right\rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \left|\pm\right\rangle \tag{5.15}$$

$$\hat{S}_z \left|\pm\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} \left|\pm\right\rangle \tag{5.16}$$

$$\hat{S}_+ \left|+\right\rangle = 0 = \hat{S}_- \left|-\right\rangle \tag{5.17}$$

$$\hat{S}_+ \left|-\right\rangle = \hbar \left|+\right\rangle \tag{5.18}$$

$$\hat{S}_- \left|+\right\rangle = \hbar \left|-\right\rangle \tag{5.19}$$

Matrice de Pauli : On peut déterminer les matrices representatives des operetauers de spin en utilisant une méthode simple. En effet, tout opérateur $\hat{B}$ peut s'écrit dans la base $\{\left|+\right\rangle, \left|-\right\rangle\}$ comme

$$(B) \equiv \begin{pmatrix} B_{++} & B_{+-} \\ B_{-+} & B_{--} \end{pmatrix} \tag{5.20}$$

dont les élements de matrice sont dans la forme

$$B_{\pm\pm} = \left\langle\pm\right| B \left|\pm\right\rangle \tag{5.21}$$

$$B_{\pm\mp} = \left\langle\pm\right| B \left|\mp\right\rangle \tag{5.22}$$

Application immédiate donne

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \tag{5.23}$$

$$\hat{S}_+ = \hbar = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.24}$$

$$\hat{S}_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.25}$$

Egalement on a

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \tag{5.26}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \tag{5.27}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\mathbb{I} \tag{5.28}$$

On montre que ces matrices verifaint les relations de commutation :

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hbar\hat{S}_z \tag{5.29}$$

$$\left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = i\hbar\hat{S}_x \tag{5.30}$$

$$\left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = i\hbar\hat{S}_y \tag{5.31}$$

5.3 Etude Globale d'une Particule de Spin $\frac{1}{2}$

5.3.1 Spineur

L'état golobal d'une particle de spin $\frac{1}{2}$ est le produit tensoriel des deux états spacial $\left|\psi_0\right\rangle \in \xi_0$ et de spin $\left|\psi_s\right\rangle \in \xi_s$. Il s'agit de

$$\left|\psi\right\rangle = \left|\psi_0\right\rangle \otimes \left|\psi_s\right\rangle \tag{5.32}$$

dont l'éspace de Hilbert correspondant est

$$\xi = \xi_0 \otimes \xi_s \tag{5.33}$$

avec ξ_0 et ξ_s ont pour base $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|+\rangle, |-\rangle\} = \{|\varepsilon_s\rangle\}$. Donc la base de ξ est $\{|\vec{r}, \varepsilon_s\rangle\} = \{|\vec{r}\rangle \otimes |\varepsilon_s\rangle\}$. Cette base verifie la relation d'orthonormalisation :

$$\left\langle \vec{r'}, \varepsilon'_s \middle| \vec{r}, \varepsilon_s \right\rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r'})\delta_{\varepsilon_s \varepsilon'_s} \tag{5.34}$$

et la relation de fermeture :

$$\sum_{\varepsilon_s} \int d^3r \, |\vec{r}, \varepsilon_s\rangle \langle \vec{r}, \varepsilon_s| = \mathbb{I} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \int d^3r \, |\vec{r}, +\rangle \langle \vec{r}, +| + \int d^3r \, |\vec{r}, -\rangle \langle \vec{r}, -| = \mathbb{I} \tag{5.35}$$

Si $|\psi\rangle \in \xi$ alors

$$|\psi\rangle = \mathbb{I} \, |\psi\rangle = \int d^3\vec{r} \, |\vec{r}, +\rangle \langle \vec{r}, +|\psi\rangle + \int d^3\vec{r} \, |\vec{r}, -\rangle \langle \vec{r}, -|\psi\rangle = \mathbb{I} \tag{5.36}$$

ce qui donne

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{r} \psi_+(\vec{r}) \, |\vec{r}, +\rangle + \int d^3\vec{r} \psi_-(\vec{r}) \, |\vec{r}, -\rangle \tag{5.37}$$

Donc le ket $|\psi\rangle$ peut être representée par

$$[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.38}$$

dit spineur de Pauli. Le bras correspondant est

$$[\psi]^*(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+^*(\vec{r}) & \psi_-^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.39}$$

Le produit scalaire de deux spineurs de Pauli ϕ et ψ est

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3r [\phi]^*(\vec{r})[\psi](\vec{r}) = \int d^3r (\phi_+^*(\vec{r}) \quad \phi_-^*(\vec{r})) \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.40}$$

ou bien

$$\boxed{\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3r \{\phi_+^*(\vec{r})\psi_+(\vec{r}) + \phi_-^*(\vec{r})\psi_-(\vec{r})\}} \tag{5.41}$$

En particulier pour $\psi = \phi$, on trouve

$$\boxed{\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r \{\mid \psi_+(\vec{r}) \mid^2 + \mid \psi_-(\vec{r}) \mid^2\}} \tag{5.42}$$

Si on a $|\psi_s\rangle = a_+ \, |+\rangle + a_- \, |-\rangle$ alors

$$[\psi](\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} \qquad [\psi]^*(\vec{r}) = \psi_0^*(\vec{r}) \begin{pmatrix} a_+^* & a_-^* \end{pmatrix}$$

avec

$$\int d^3r \; |\psi_0(\vec{r})|^2 = 1, \qquad |a_+|^2 + |a_-|^2 = 1 \tag{5.43}$$

Donc on trouve

$$\boxed{\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r |\psi_0(\vec{r})|^2 (|a_+|^2 + |a_-|^2)}$$

5.3.2 Action d'un opérateur sur un spineur

1. **Opérateur spin** :

$$\hat{S}^2 |\psi\rangle = \hat{S}^2 \int d^3\vec{r}\psi_+(\vec{r}) |\vec{r},+\rangle + \hat{S}^2 \int d^3\vec{r}\psi_-(\vec{r}) |\vec{r},-\rangle = \frac{3\hbar^2}{4} |\psi\rangle \tag{5.44}$$

ou bien

$$\boxed{\hat{S}^2[\psi](\vec{r}) = \frac{3\hbar^2}{4}[\psi](\vec{r})} \tag{5.45}$$

$$\hat{S}_z[\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ -\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.46}$$

$$\hat{S}_+[\psi](\vec{r}) = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} \psi_-(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.47}$$

$$\hat{S}_-[\psi](\vec{r}) = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_+(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.48}$$

$$\hat{S}_x[\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \psi_-(\vec{r}) \\ \psi_+(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.49}$$

$$\hat{S}_y[\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix} \psi_-(\vec{r}) \\ -\psi_+(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.50}$$

2. **Opérateur orbitaux** :

$$\hat{x}[\psi](\vec{r}) = \hat{x}\begin{pmatrix} \psi_-(\vec{r}) \\ \psi_+(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\psi_+(\vec{r}) \\ x\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow (x) = \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix} \tag{5.51}$$

$$\hat{p}_x[\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\partial x\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_+}{\partial x} \\ \frac{\partial\psi_-}{\partial x} \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow (p_x) = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \partial x & 0 \\ 0 & \partial x \end{pmatrix} \tag{5.52}$$

$$\hat{L}_z[\psi](\vec{r}) = \hat{L}_z\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \partial_\varphi\psi_+(\vec{r}) \\ \partial_\varphi\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.53}$$

3. **Opérateur mixte** :

$$\hat{L}_z\hat{S}_z[\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2i}\begin{pmatrix} \partial_\varphi\psi_+(\vec{r}) \\ -\partial_\varphi\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.54}$$

4. **Opérateur spin orbite** : Cet opérateur est proportionnelle à $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ avec

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \hat{L}_x\hat{S}_x + \hat{L}_y\hat{S}_y + \hat{L}_z\hat{S}_z \tag{5.55}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\hat{L}_-\hat{S}_+ + \hat{L}_+\hat{S}_-\right) + \hat{L}_z\hat{S}_z \tag{5.56}$$

$$\tag{5.57}$$

ou bien

$$\left(\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & -\hat{L}_z \end{pmatrix} \tag{5.58}$$

Son action sur le spineur est

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}[\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \hat{L}_z\psi_+(\vec{r}) + \hat{L}_-\psi_-(\vec{r}) \\ \hat{L}_+\psi_+(\vec{r}) - \hat{L}_z\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.59}$$

5.3.3 Opérateur rotation globale

L'opérateur moment cinétique totale est

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \tag{5.60}$$

L'opérateur de rotation autour d'un axe de vecteur unitaire $\vec{u}$ d'angle α s'écrit comme

$$\begin{aligned} \hat{R}^J_{\vec{u}}(\alpha) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{\vec{J}}\cdot\hat{\vec{u}}} && (5.61)\\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\alpha\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{u}}+\alpha\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{u}}\right)} && (5.62)\\ &= \hat{R}^L_{\vec{u}} \otimes \hat{R}^S_{\vec{u}} && (5.63)\end{aligned}$$

L'action de $\hat{R}^L_{\vec{u}}(\alpha)$ sur le spineur :

$$\begin{aligned} \hat{R}^L_{\vec{u}}(\alpha)[\psi](\vec{r}) &= e^{\frac{-i}{\hbar}\alpha\hat{\vec{L}}\cdot\vec{u}} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_+(\vec{r}) \\ \phi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = [\phi](\vec{r}) && (5.64)\\ &= \int d^3r\{\phi_+(\vec{r})\,|\vec{r},+\rangle + \phi_-(\vec{r})\,|\vec{r},-\rangle\} && (5.65)\end{aligned}$$

L'action de $\hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha)$ sur le spineur :

$$\hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha)[\psi](\vec{r}) \Longrightarrow ? \qquad \text{ou bien } \hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha) = |\,\psi >= ? \tag{5.66}$$

On a

$$\begin{aligned} \hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{u}}} = e^{-\frac{i}{2}\alpha\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{u}}} && (5.67)\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{2}\alpha\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{u}}\right)^n && (5.68)\end{aligned}$$

avec $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$. Notons que

$$(\vec{\sigma}.\vec{u})^n = \begin{cases} 1 & \text{si } n \text{ est pair } (n = 2k) \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{u} & \text{si } n \text{ est impair } (n = 2k+1) \end{cases} \tag{5.69}$$

Donc on trouve

$$\boxed{\hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha) = 1\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{u}\sin\frac{\alpha}{2}} \tag{5.70}$$

ou bien

$$\hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} - iu_z\sin\frac{\alpha}{2} & -iu_-\sin\frac{\alpha}{2} \\ iu_+\sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} + iu_z\sin\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \tag{5.71}$$

avec $u_\pm = u_x \pm iu_y$. En coordonnées sphériques :

$$\vec{u}\begin{cases} u_x = \sin\theta\cos\varphi \\ u_y = \sin\theta\sin\varphi \\ u_z = \cos\theta \end{cases}, \qquad \|\vec{u}\|^2 = 1 \tag{5.72}$$

On obtient

$$\begin{aligned} \hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} - i\sin\theta\sin\frac{\alpha}{2} & -i\sin\theta e^{-i\varphi}\sin\frac{\alpha}{2} \\ i\sin\theta e^{i\varphi}\sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} + i\cos\theta\sin\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \quad \text{à verifier?} && (5.73)\\ &= \begin{pmatrix} R_{++} & R_{+-} \\ R_{-+} & R_{--} \end{pmatrix} && (5.74)\end{aligned}$$

Notons que

$$\hat{R}^S_{\vec{u}}(2\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\hat{\mathbb{I}} \tag{5.75}$$

$$\hat{R}^S_{\vec{u}}(4\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbb{I}} \tag{5.76}$$

Finalement l'action est

$$\hat{R}^S_{\vec{u}}(\alpha)[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} R_{++} & R_{+-} \\ R_{-+} & R_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{5.77}$$

$$= \begin{pmatrix} R_{++}\psi_+(\vec{r}) + R_{+-}\psi_-(\vec{r}) \\ R_{-+}\psi_+(\vec{r}) + R_{--}\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \equiv [\psi](\vec{r}) \tag{5.78}$$

Chapitre 6

Composition Des Moment Cinétiques

6.1 Introduction

Pour une particule sans spin l'ensemble $\left\{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}}), \hat{L}^2, \hat{L}_z\right\}$ forme un ensemble complet des observables qui commutent (ECOC), c'est à dire lorsqu'on effectue la mesure sur l'une des grandeurs l'état ne change pas. Considérons l'interaction spin-orbite :

$$W = \alpha \vec{L} \cdot \vec{S} \tag{6.1}$$

On peut définir un Hamiltonien comme

$$\hat{H}' = \hat{H} + \hat{W} \tag{6.2}$$

L'ensemble $\left\{\hat{H}', \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z\right\}$ ne forme pas ECOC car les deux relations de commutation suivantes ne sont pas nulles :

$$\left[\hat{H}', \hat{L}_z\right] \neq 0, \qquad \left[\hat{H}', \hat{S}_z\right] \neq 0 \tag{6.3}$$

En effet :

$$\left[\hat{H}', \hat{L}_z\right] = \left[\hat{H}_0, \hat{L}_z\right] + \alpha \left[\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}, \hat{L}_z\right] \tag{6.4}$$

or

$$\left[\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{L}_x\hat{S}_x + \hat{L}_y\hat{S}_y + \hat{L}_z\hat{S}_z, \hat{L}_z\right] \tag{6.5}$$

$$= \left[\hat{L}_x, \hat{L}_z\right]\hat{S}_x + \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right]\hat{S}_y \tag{6.6}$$

$$= i\hbar\left(-\hat{L}_y\hat{S}_x + \hat{L}_x\hat{S}_y\right) \tag{6.7}$$

ce qui implique

$$\left[\hat{H}', \hat{L}_z\right] = i\hbar\left(\hat{L}_x\hat{S}_y - \hat{L}_y\hat{S}_x\right) \neq 0 \tag{6.8}$$

De même on montre le resultat :

$$\left[\hat{H}', \hat{S}_z\right] = i\hbar\left(\hat{L}_y\hat{S}_x - \hat{L}_x\hat{S}_y\right) \neq 0 \tag{6.9}$$

On voit que d'apres Eqs. (6.8) et (6.9) on peut construire des opérateurs qui commutent. Il s'agit de

$$\left[\hat{H}', \hat{L}_z + \hat{S}_z\right] = \left[\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}, \hat{L}_z + \hat{S}_z\right] = 0 \tag{6.10}$$

donc $\hat{H}'$ commute avec $\hat{L}_z + \hat{S}_z$, qui peut s'écrire encore comme

$$\left[\hat{H}', \hat{J}_z\right] = 0 \tag{6.11}$$

avec $J_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$. On peut définir d'une façons générale :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \qquad \Longrightarrow \qquad \left[\hat{H}', \hat{J}^2\right] = 0 \tag{6.12}$$

Donc il faut chercher une base caumune aux observables $\left\{\hat{H}', \hat{J}^2, \hat{J}_z\right\}$ à partir des états de moments cinétiques $\hat{L}_z$ et $\hat{S}_z$.

D'une façons générale, le problème (en haut) revient donc à étudier les états propres du moument cinétique :

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \tag{6.13}$$

dont $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ peuvent être comme

$$\vec{J}_1 = \vec{S}, \vec{S}_1, \vec{L}_1 \tag{6.14}$$

$$\vec{J}_2 = \vec{L}, \vec{S}_2, \vec{L}_2 \tag{6.15}$$

tels que :

$$\begin{cases} \vec{J}_1 & \text{agit dans l'espace } \xi_1 \\ \vec{J}_2 & \text{agit dans l'espace } \xi_2 \end{cases} \Longrightarrow \qquad \xi = \xi_1 \otimes \xi_2 \tag{6.16}$$

Puisque on

$$\vec{J}_i \wedge \vec{J}_i = i\hbar \vec{J}_i, \qquad i = 1, 2 \tag{6.17}$$

donc on peut avoir même relation pour le moment cinétique global :

$$\vec{J} \wedge \vec{J} = i\hbar \vec{J} \tag{6.18}$$

D'autre part, on peut écrire les deux moments cinétiques comme

$$\vec{J}_1 \equiv \vec{J}_1 \otimes \mathbb{I}_2 \equiv \tilde{\vec{J}}_1 \tag{6.19}$$

$$\vec{J}_2 \equiv \vec{J}_2 \otimes \mathbb{I}_1 \equiv \tilde{\vec{J}}_2 \tag{6.20}$$

Ce qui implique

$$\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar \hat{J}_z = \left[\hat{J}_{1x} + \hat{J}_{2x}, \hat{J}_{1y} + \hat{J}_{2y}\right] \tag{6.21}$$

$$\left[\hat{J}^2, \hat{J}_\mu\right] = 0, \qquad \mu = x, y, z \tag{6.22}$$

6.2 Coefficients Clebsh Gorden

Il y a deux groupes d'observables commutables :

1. L'ensemble $\left\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}\right\}$ dont les bases correspondantes sont

$$|j_1, m_1\rangle \longrightarrow \xi_1, \qquad |j_2, m_2\rangle \longrightarrow \xi_2 \tag{6.23}$$

donc

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \equiv |m_1, m_2\rangle \longrightarrow \xi \tag{6.24}$$

avec $\dim \xi = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ pour j_1, j_2 fixés. Les actions sur cette base sont

$$\hat{J}_i^2 |j_i, m_i\rangle = \hbar^2 j_i(j_i + 1) |j_i, m_i\rangle \tag{6.25}$$

$$\hat{J}_{iz} |j_i, m_i\rangle = \hbar m_i |j_i, m_i\rangle \tag{6.26}$$

2. L'ensemble $\left\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2\right\}$ de base commune $|j, m, j_1, j_2\rangle = |j, m\rangle$ dont les actions sont

$$\hat{J}_i^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1) |j,m\rangle , \qquad i = 1, 2 \tag{6.27}$$
$$\hat{J}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j,m\rangle \tag{6.28}$$
$$\hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle \tag{6.29}$$

Pour j_1, j_2 fixes, la relation de fermeture pour la base $|m_1, m_2\rangle$ est donnée par

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |m_1, m_2\rangle \langle m_1, m_2| = \mathbb{I} \tag{6.30}$$

On a

$$|j,m\rangle = \mathbb{I} |j,m\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle m_1, m_2|j,m\rangle |m_1, m_2\rangle \tag{6.31}$$

avec $\langle m_1, m_2|j,m\rangle$ sont appelés les coefficients de Clebsh-Gorden. Inversement on peut avoir autres coefficients :

$$|m_1, m_2\rangle = \mathbb{I} |m_1, m_2\rangle = \sum_{m=-j}^{j} \sum_{j} \langle j,m|m_1, m_2\rangle |j,m\rangle \tag{6.32}$$

Donc on trouve

$$\langle m_1, m_2|j,m\rangle = \langle j,m|m_1, m_2\rangle^* \tag{6.33}$$

qui sont réels par convention.

6.3 Valeurs Propres de $\hat{J}_z$ et $\hat{J}^2$

On commence par la recharche des valeures propres de $\hat{J}_z$. En effet, pour un etat donné $|j,m\rangle$ on a

$$\hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle \tag{6.34}$$

On compo se cette équation par le bras $\langle m_1, m_2|$ pour avoir

$$\langle m_1, m_2| \hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m \langle m_1, m_2|j,m\rangle \tag{6.35}$$
$$= \langle m_1, m_2| \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} |j,m\rangle \tag{6.36}$$
$$(m_1 + m_2) \langle m_1, m_2|j,m\rangle = \hbar m \langle m_1, m_2|j,m\rangle \tag{6.37}$$

qui donne

$$\langle m_1, m_2|j,m\rangle (m_1 + m_2 - m) = 0 \tag{6.38}$$

ou bien

$$\boxed{m_1 + m_2 = m} \tag{6.39}$$

car les coeffissions de Clebsh-Gorden ne sont pas nuls. Donc les valeurs propres de $\hat{J}_z$ est la somme des vecteurs propres de $\hat{J}_{iz}$, i.e. $\{\hbar m = \hbar(m_1 + m_2)\}$.

Les valeurs propres de J^2 peuvent s'obtenir comme suit pour j_1 et j_2 fixés, les valeurs possibles de j sont

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \cdots , |j_1 - j_2| \tag{6.40}$$

avec la régle du triangle :

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \tag{6.41}$$
$$|j - j_2| \leq j_1 \leq j + j_2 \tag{6.42}$$
$$|j_1 - j| \leq j_2 \leq j + j_1 \tag{6.43}$$

Exemple : Pour $j_1 = 1$ et $j_2 = \frac{3}{2}$ on trouve les valeurs suivantes pour j :

$$j = 1 + \frac{3}{2}, 1 + \frac{3}{2} - 1, 1 + \frac{3}{2} - 2, \cdots, \left|1 - \frac{3}{2}\right| \quad \Longrightarrow \quad j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \tag{6.44}$$

Puisque $-j \leq m \leq j$ donc les valeurs possibles de m sont

$$m = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \tag{6.45}$$
$$m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \tag{6.46}$$
$$m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \tag{6.47}$$

On remarque qu'il y a dégénérescence, en effet :

$$m: \quad -\frac{5}{2} \quad -\frac{3}{2} \quad -\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \quad \frac{5}{2} \tag{6.48}$$
$$g(m): \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \tag{6.49}$$

ou bien on a $m = m_1 + m_2$ avec

$$\begin{cases} m_1 = -1, 0, 1, & -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ m_2 = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} & -j \leq m_2 \leq j \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad m = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$$

6.4 Application: Addition de Deux Spin $\frac{1}{2}$

Pour donner une illustration de cette composition des moments cinetiques, on va considérer l'exemple dans lequel les $\vec{J_i}$ seront fixés comme étant deux spin $\frac{1}{2}$, tels que :

$$\vec{J_1} = \vec{S_1}, \qquad \vec{J_2} = \vec{S_2} \tag{6.50}$$

ce qui donne un moment global :

$$\vec{J} = \vec{S} = \vec{S_1} + \vec{S_2} \tag{6.51}$$

avec $s_1 = \frac{1}{2}$ et $s_2 = \frac{1}{2}$, ce qui donne $s = 0, 1$. Donc il y a deux possibilités :

- $\left\{S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z}\right\}$ est ECOC donc la base commune $\{|s_1, m_1, s_2, m_2\rangle \equiv |m_1, m_2\rangle\}$ avec

$$\{|m_1, m_2\rangle\} = \left\{\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \tag{6.52}$$
$$\equiv \{|+,+\rangle, |+,-\rangle, |-,+\rangle, |-,-\rangle\} \tag{6.53}$$

- $\left\{S^2, S_z, S_1^2, S_2^2\right\}$ est ECOC de base $\{|s, m, s_1, s_2\rangle \equiv |s, m\rangle\}$:

$$\{|s, m\rangle\} = \{|1, m\rangle, |0, 0\rangle\} \tag{6.54}$$
$$\equiv \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle\} \tag{6.55}$$

On voit que pour $s = 0$ il y a un seul état $|0, 0\rangle$ dit état singulier. Par contre pour $s = 1$ il y a trois états $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$ dit état triplet.

Considérons la relation de fermuture pour la base $|m_1, m_2\rangle$ du premier ECOC :

$$\sum_{m_1,m_2} |m_1, m_2\rangle \langle m_1, m_2| = \mathbb{I} \tag{6.56}$$

Donc la base $|s, m\rangle$ du deuxiéme ECOC peut s'écrire comme

$$|s, m\rangle = \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \langle m_1, m_2|s, m\rangle |m_1, m_2\rangle \tag{6.57}$$

$$= \alpha |-,-\rangle + \beta |-,+\rangle + \gamma |+,-\rangle + \delta |+,+\rangle \tag{6.58}$$

avec les coefficients :

$$\alpha = \langle -,-|s, m\rangle \tag{6.59}$$

$$\beta = \langle -,+|s, m\rangle \tag{6.60}$$

$$\gamma = \langle +,-|s, m\rangle \tag{6.61}$$

$$\delta = \langle +,+|s, m\rangle \tag{6.62}$$

Rappellons que l'action de $\hat{S}^2$ sur cette base est

$$\hat{S}^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle \tag{6.63}$$

ce qui implique

$$\hat{S}^2\{\alpha |-,-\rangle + \beta |-,+\rangle + \gamma |+,-\rangle + \delta |+,+\rangle\}$$
$$= \hbar^2 s(s+1)\{\alpha |-,-\rangle + \beta |-,+\rangle + \gamma |+,-\rangle + \delta |+,+\rangle\} \tag{6.64}$$

D'autre part on a

$$\hat{\vec{S}}^2 = \left(\hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2\right)^2 \tag{6.65}$$

$$= \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\hat{\vec{S}}_1^2\hat{\vec{S}}_2^2 \tag{6.66}$$

$$= \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\left(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}\right) + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} \tag{6.67}$$

$$= \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} \tag{6.68}$$

Par conséquent on trouve

$$\hat{S}^2 |-,-\rangle = \left(\hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\right) |-,-\rangle \tag{6.69}$$

$$= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |-,-\rangle + \frac{\hbar^2}{2} |-,-\rangle = 2\hbar^2 |-,-\rangle \tag{6.70}$$

$$\hat{S}^2 |+,+\rangle = \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |+,+\rangle + \frac{\hbar^2}{2} |+,+\rangle = 2\hbar^2 |+,+\rangle \tag{6.71}$$

$$\hat{S}^2 |-,+\rangle = \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |-,+\rangle + \hbar^2 |+,-\rangle - \frac{\hbar^2}{2} |-,+\rangle \tag{6.72}$$

$$= \hbar^2 (|-,+\rangle + |+,-\rangle) \tag{6.73}$$

$$\hat{S}^2 |+,-\rangle = \hbar^2 (|-,+\rangle + |+,-\rangle) \tag{6.74}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} & s(s+1)\left\{\alpha\left|-,-\right\rangle+\beta\left|-,+\right\rangle+\gamma\left|+,-\right\rangle+\delta\left|+,+\right\rangle\right\} \\ = \;& 2\alpha\left|-,-\right\rangle+\beta\left(\left|-,+\right\rangle+\left|+,-\right\rangle\right)+\gamma\left(\left|-,+\right\rangle+\left|+,-\right\rangle\right)+2\delta\left|+,+\right\rangle \quad (6.75) \\ = \;& 2\alpha\left|-,-\right\rangle+(\beta+\gamma)\left(\left|-,+\right\rangle+\left|+,-\right\rangle\right)+2\delta\left|+,+\right\rangle \quad (6.76) \end{aligned}$$

Multiplions par:

$$\langle -,-| \implies 2\alpha=\alpha s(s+1) \quad (6.77)$$

$$\langle +,+| \implies 2\delta=\delta s(s+1) \quad (6.78)$$

$$\langle -,+| \implies \beta+\gamma=\beta s(s+1) \quad (6.79)$$

$$\langle +,-| \implies \beta+\gamma=\gamma s(s+1) \quad (6.80)$$

Pour $s=0$ on obtient

$$\alpha=\delta=0, \qquad \beta=-\gamma \quad (6.81)$$

La condition de normalisation donne

$$|\beta|=\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (6.82)$$

et par suite à un facteur de phase globale prés, l'état singulier est

$$|0,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+,-\right\rangle+\left|-,+\right\rangle\right) \quad (6.83)$$

Pour $s=1$ on a

$$\alpha,\delta, \qquad \beta=\gamma \quad (6.84)$$

ce qui donne l'état

$$|1,m\rangle=\alpha\left|-,-\right\rangle+\beta\left|-,+\right\rangle+\gamma\left|+,-\right\rangle+\delta\left|+,+\right\rangle \quad (6.85)$$

Pour $m=1$ les coefficients de Clebsh-Gorden seront nuls si $m_1+m_2\neq m$ et donc

$$\alpha=\beta=0, \qquad \delta\neq 0 \quad (6.86)$$

ce qui donne

$$|1,1\rangle=\delta\left|+,+\right\rangle, \qquad \text{C.N} \implies |1,1\rangle=\left|+,+\right\rangle \quad (6.87)$$

Pour $m=0$ on a

$$\alpha=\delta=0, \quad \beta\neq 0 \quad (6.88)$$

et par suite

$$|\,1,0>=\beta\left(|\,+,->+\,|\,-,+>\right), \quad (6.89)$$

$$\text{C.N} \implies |1,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+,-\right\rangle+\left|-,+\right\rangle\right) \quad (6.90)$$

Pour $m=-1$ on trouve

$$\beta=\delta=0 \implies |1,-1\rangle=\left|-,-\right\rangle \quad (6.91)$$

Exercice : Refaire le même travail pour $l=1$ et $s=\frac{1}{2}$ avec

$$\vec{J}=\vec{L}+\vec{S} \implies j=\frac{3}{2},\frac{1}{2}. \quad (6.92)$$